

**MONTE CARLO YÖNTEMİYLE DÜŞÜK ENERJİLİ
POZİTRONLARIN MADDE İLE ETKİLEŞİMİNİN
VE HEDEFLERDE DURDURULMASININ
İNCELENMESİ**

Ahmet ÇETİN

**DOKTORA TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI**

Danışman : Yrd.Doç.Dr. Kemal KOÇ

EDİRNE - 2012

T.C.
TRAKYA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

**MONTE CARLO YÖNTEMİYLE DÜŞÜK ENERJİLİ POZİTRONLARIN
MADDE İLE ETKİLEŞİMİNİN ve HEDEFLERDE DURDURULMASININ
İNCELENMESİ**

Ahmet ÇETİN

DOKTORA TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI

Bu tez 29/06/2012 tarihinde Aşağıdaki Jüri Tarafından Kabul Edilmiştir.

Prof.Dr.A.Güneş TANIR (Başkan)
Prof.Dr. Hasan AKBAŞ (Üye)
Prof.Dr.Ş.Erol OKAN (Üye)
Yrd.Doç.Dr.Mustafa TELCİ (Üye)
Yrd.Doç.Dr.Kemal KOÇ (Danışman - Üye)

.....
.....
.....
.....
.....

Doktora Tezi**Monte Carlo Yöntemiyle Düşük Enerjili Pozitronların Madde İle Etkileşiminin ve Hedeflerde Durdurulmasının İncelenmesi****T.Ü. Fen Bilimleri Enstitüsü****Fizik Anabilim Dalı****Ö Z E T**

Bu çalışmada, Monte Carlo yöntemi kullanılarak düşük ve orta enerjili (20eV – 10keV) pozitronların madde ile etkileşmesinin incelenmesi amaçlanmıştır. Esnek çarpışmalar, Wentzel ekranlama parametresinin kullanıldığı Ekranlanmış Rutherford saçılma formülü ile esnek olmayan çarpışmalar Liljequist tarafından elektron-madde etkileşmesi için önerilen model pozitron etkileşmesi için yeniden düzenlenerek kullanılmıştır. Pozitron-madde etkileşimi rastgelelik içerdiğinden benzetişim için Monte-Carlo Yöntemi kullanılmıştır. Pozitron için ortalama serbest yol ve durdurma gücü hesapları farklı hedefler için yapılmıştır. Yazılan bilgisayar programı ile Alüminyum, Silikon, Bakır ve Su için elde edilen sonuçlar PENELOPE programından elde edilen sonuçlarla karşılaştırılmış ve sonuçların uyumlu olduğu görülmüştür. Aynı program ile Berilyum ve DNA'nın insan genetiği üzerindeki önemi nedeni ile DNA'yı oluşturan Adenin, Guanin, Timin ve Sitozin bileşikleri için sonuçlar alınmış, tablolar ve grafikler halinde sunulmuştur.

Yıl : 2012**Sayfa Sayısı** : 76**Anahtar Kelimeler** : Pozitron, Monte-Carlo Yöntemi, Ortalama Serbest Yol, Durdurma Gücü, DNA

Ph.D. Thesis

The Examination of The Low-Energy Positrons' Interaction With Matter and Stopping on The Targets With Monte Carlo Method

T.Ü. Institute of Naturel Science

Physics Department

SUMMARY

In this study, it was aimed to investigate the interaction of low-energy positrons (20eV-10keV) with matter by using Monte Carlo Method. Elastic collisions were used with screened Rutherford scattering formula where Wentzel screening parameter was utilized. Inelastic collisions were used by re-editing for model-positron interaction proposed for electron-matter interaction by Liljequist. Because positron-matter interaction involves randomness, the simulation was done with Monte Carlo Method. Mean free path and stopping power of matter were calculated for positron in several matters. With the computer programme written, the results gained for water, copper, silicone and aluminium were compared with the results from PENELOPE programme and the compability of the results were observed. With the same programme, because of the importance of DNA on human genome, the results for adenine, guanine, thymine and cytosine compounds, which create DNA, were taken and were presented in the form of tables and graphs.

Year : 2012

Number of Page : 76

Key Words : Positron, Monte-Carlo Method, Mean Free Path,
Stopping Power, DNA

Ö N S Ö Z

Uzun yıllardır elektron-madde etkileşmeleri için birçok çalışma yapılmış ve bu çalışmalar sonucunda elde edilen en önemli ürünlerden biri elektron mikroskobu olmuştur. Elektron-madde etkileşmeleri çalışmalarına göre daha yeni bir çalışma alanı olan pozitron-madde etkileşmelerinin önemli bir uygulaması da son yıllarda tıp alanında önemli bir yer almaya başlayan Pozitron Emisyon Tomografi (PET) tekniğidir. Bu çalışmada pozitronun DNA üzerindeki etkisini incelemek amacıyla elektron-madde etkileşmesi çalışmalarından elde edilen çalışma tekniklerinden esinlenilerek pozitron-madde etkileşmesi için bir benzetişim programı yazılarak, DNA'nın temel taşları olan adenin, guanin, timin ve sitozin maddelerinin pozitron ile etkileşmelerinin incelenmesi amaçlanmıştır.

Bu konuyu çalışmamı öneren Gazi Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü Öğretim Üyesi Prof. Dr. A. Güneş TANIR ve Başkent Üniversitesi Eğitim Fakültesi Öğretim Üyesi ve Danışmanım Yrd. Doç. Dr. Kemal KOÇ'a öncelikle beni öğrenci olarak kabul ettikleri ve güvendikleri için çok teşekkür ediyorum. Değerli vakitlerini beni yönlendirmek, bana bilgi aktarmak için harcadıkları için de müteşekkirim.

Danışman Hocalarımla tanışmama yardımcı olan, Ankara'da geçen üniversite öğrencilik yıllarımdan beri çok sevdiğim arkadaşım Tümgeneral Berkay TURGUT ve Başkent Üniversitesi Rektör Yardımcısı Prof. Dr. A.Kadir VAROĞLU'na teşekkür borçluyum.

Doktora çalışmam süresince birçok doktora dersini aldığım Trakya Üniversitesi Fen Fakültesi Fizik Bölümü Öğretim Üyesi Doç. Dr. Mirza KERİM'e, beni kırmayıp Tez İzleme Komitemde yer alan Trakya Üniversitesi Fen Fakültesi Matematik Bölümü Öğretim Üyesi Yrd. Doç. Dr.Mustafa TELCİ'ye, hem Tez İzleme Komitemde yer alan hem de her sıkıştığımda sorularıyla meşgul ettiğim Trakya Üniversitesi Fen Fakültesi Dekanı ve Fizik Bölümü Öğretim Üyesi Prof. Dr. Ş. Erol OKAN'a, öğrencisi olarak bağlı bulunduğum Fen Bilimleri Enstitüsü Akademik ve İdari personeline, son olarak da doktora başlamamda yardımını göz ardı edemeyeceğim Doç. Dr. Mustafa ÖZCAN'a teşekkür ediyorum.

Bu süreçte manevi desteklerini esirgemeyen Prof.Dr. Beyhan KARAMANLIOĞLU'na, Prof.Dr.Ahmet CİHAN'a, Prof.Dr.Hasan AKBAŞ'a, eşim Öğr. Gör. Meliha ÇETİN ve kızım Elçin ÇETİN'ine de teşekkür ediyorum.

Ahmet ÇETİN
Edirne – 2012

İÇİNDEKİLER

	Sayfa No
ÖZET	i
SUMMARY	ii
ÖNSÖZ	iii
İÇİNDEKİLER	iv
SİMGELER ve KISALTMALAR	v
TABLolar LİSTESİ	vi
ŞEKİLLER LİSTESİ	vii
BÖLÜM 1. GİRİŞ	1
BÖLÜM 2. TEMEL BİLGİLER	4
2.1. Elastik Çarpışma	4
2.2. Elastik Olmayan Çarpışmalar (Atomik Uyarılma – İyonizasyon) ..	6
BÖLÜM 3. BENZETİŞİM PROGRAMI ve AÇIKLAMALAR	14
3.1. Pozitron-Madde Etkileşmesi İçin Monte Carlo Algoritması	14
3.2. Hedef Maddenin Modellenmesinde Kullanılan Nicelikler ve Hesaplanmaları	17
3.2.1. Element Hedefler	17
3.2.2 Bileşik Madde Hedefler ve Karakteristik Özelliklerinin Hesaplanması	18
3.2.3 Bileşik Madde Hedeflerin Karakteristik Özelliklerini Hesaplayan Program ve Ekran Görüntüsü	21
3.3. Hesaplamalarda Kullanılan Program ve Ekran Görüntüsü	25
3.4. Örnek Olarak Alüminyum Atomu ile Pozitron Etkileşmesinin İncelenmesi	29
BÖLÜM 4. SONUÇLAR ve TARTIŞMA	32
4.1. Alüminyum	33
4.2. Berilyum	38
4.3. Silikon	42
4.4. Bakır	47

	Sayfa No
4.5. Su	53
4.6. Guanin	57
4.7. Adenin	61
4.8. Timin	65
4.9. Sitozin	69
KAYNAKLAR	73
ÖZGEÇMİŞ	76

SİMGELER ve KISALTMALAR

σ	:	Toplam Tesir Kesiti (cm^2)
ρ	:	Yoğunluk (gr/cm^3)
λ	:	Ortalama Serbest Yol (Mean Free Path) (cm)
λ^{-1}	:	Ortalama Serbest Yolun Tersi (cm^{-1})
β	:	Atom çekirdeğinin e- veya e+ bozunmasının ortak adı
E	:	Pozitronun geliş enerjisi (eV)
W	:	Etkileşim sırasında pozitronun kaybettiği enerji (eV)
I	:	Ortalama iyonizasyon enerjisi (eV)
W_i	:	Rezonans enerjisi (eV)
p	:	Pozitronun geliş momentumu
p'	:	Etkileşimden sonra pozitronun momentumu
q	:	Etkileşimden sonra atomik elektrona aktarılan momentum
Q	:	q momentumuna karşı gelen enerji
S	:	Hedefin durdurma gücü (eV/cm)
Z	:	Atom numarası
A	:	Atom ağırlığı
N_a	:	Avagadro Sayısı
f_i	:	Titreşken şiddeti
eV	:	Enerji birimi - elektronvolt

TABLULAR LİSTESİ

Tablo 3.1 Atom özellikleri

Tablo 3.2 Atom genelleştirilmiş titreşken şiddetleri

Tablo 3.3 Atom rezonans enerjileri

Tablo 3.4 Bileşiklerin hesaplanmasında kullanılan bazı atomların rezonans enerjileri
(Akar, 2005)

Tablo 3.5 Benzetişim programında hedef olarak kullanılan bileşik maddelere ait
hesaplanan karakteristik değerler

Tablo 4.1a Alüminyum için benzetişim sonuçları

Tablo 4.1b Alüminyum için Ortalama Serbest Yolun Tersisi ve Kütle Durdurma Gücü

Tablo 4.2a Berilyum için benzetişim sonuçları

Tablo 4.2b Berilyum için Ortalama Serbest Yolun Tersisi ve Kütle Durdurma Gücü

Tablo 4.3a Silikon için benzetişim sonuçları

Tablo 4.3b Silikon için Ortalama Serbest Yolun Tersisi ve Kütle Durdurma Gücü

Tablo 4.4a Bakır için benzetişim sonuçları

Tablo 4.4b Bakır için Ortalama Serbest Yolun Tersisi ve Kütle Durdurma Gücü

Tablo 4.5a Su için benzetişim sonuçları

Tablo 4.5b Su için Ortalama Serbest Yolun Tersisi ve Kütle Durdurma Gücü

Tablo 4.6a Guanin için benzetişim sonuçları

Tablo 4.6b Guanin için Ortalama Serbest Yolun Tersisi ve Kütle Durdurma Gücü

Tablo 4.7a Adenin için benzetişim sonuçları

Tablo 4.7b Adenin için Ortalama Serbest Yolun Tersisi ve Kütle Durdurma Gücü

Tablo 4.8a Timin için benzetişim sonuçları

Tablo 4.8b Timin için Ortalama Serbest Yolun Tersisi ve Kütle Durdurma Gücü

Tablo 4.9a Sitozin için benzetişim sonuçları

Tablo 4.9b Sitozin için Ortalama Serbest Yolun Tersisi ve Kütle Durdurma Gücü

ŞEKİLLER LİSTESİ

Şekil 2.1 Pozitron – atomik elektron çarpışmasının şematik gösterimi

Şekil 3.1 Bileşik madde hedeflerin karakteristik özelliklerini hesaplayan programın örnek ekran görüntüsü

Şekil 3.2 Benzetişim için kullanılan programın örnek ekran görüntüsü

Şekil 4.1 Alüminyum için Ortalama Serbest Yolun Tersisi

Şekil 4.2 Alüminyum için Kütle Durdurma Gücü

Şekil 4.3 Berilyum için Ortalama Serbest Yolun Tersisi

Şekil 4.4 Berilyum için Kütle Durdurma Gücü

Şekil 4.5 Silikon için Ortalama Serbest Yolun Tersisi

Şekil 4.6 Silikon için Kütle Durdurma Gücü

Şekil 4.7 Bakır için Ortalama Serbest Yolun Tersisi

Şekil 4.8 Bakır için Kütle Durdurma Gücü

Şekil 4.9 Su için Ortalama Serbest Yolun Tersisi

Şekil 4.10 Su için Kütle Durdurma Gücü

Şekil 4.11 Guanin için Ortalama Serbest Yolun Tersisi

Şekil 4.12 Guanin için Kütle Durdurma Gücü

Şekil 4.13 Adenin için Ortalama Serbest Yolun Tersisi

Şekil 4.14 Adenin için Kütle Durdurma Gücü

Şekil 4.15 Timin için Ortalama Serbest Yolun Tersisi

Şekil 4.16 Timin için Kütle Durdurma Gücü

Şekil 4.17 Sitozin için Ortalama Serbest Yolun Tersisi

Şekil 4.18 Sitozin için Kütle Durdurma Gücü

BÖLÜM 1. GİRİŞ

Radyoaktivite ve radyoaktif maddelerin keşfinden beri madde-radyasyon etkileşmeleri birçok bilim insanının uğraşısı haline gelmiştir. Örneğin Rutherford, atomun yapısını incelemek için ince altın yapraklarına alfa parçacıkları göndermiş ve alfa parçacıklarının geçişlerini inceleyerek bir atom modeli önermiştir. Bu tip etkileşmeler, hem parçacığın gönderildiği hedef maddeyi hem de parçacığın madde içindeki davranışlarını incelemek açısından, fizikteki tüm problemlerde çok önemli yer tutmaktadır.

Bohr, Born, Bethe, Block gibi bilim adamları, yapılan deneysel çalışmaların sonuçlarına dayanarak, bu etkileşmeleri açıklamaya yönelik çeşitli modeller kurmuşlar ve uygun kuramsal ifadeler türetmişlerdir. Günümüzde de gelişen teknolojiye bağlı olarak madde-radyasyon etkileşmelerini incelemek için daha teknolojik deneysel düzenekler kurmak olanaklı hale gelmiştir. Ancak deneysel bazı çalışmaların hem zor işlemler içermesi hem de maliyetinin yüksek olması nedeni ile tekrar tekrar yapılmasında sıkıntı yaşanmaktadır. Bu sıkıntı son yıllarda çok yaygınlaşan bilgisayar ve benzetişim programları kullanımıyla deneylerin bilgisayar üzerinde yaratılmasıyla giderilmeye çalışılmaktadır. Ancak bilgisayar benzetişim programları kullanmak bilgisayarın hesaplama kapasitesi ile sınırlıdır.

Radyasyon etkileri özellikle biyolojik hedefler için çok önemlidir. Aşırı radyasyonun biyolojik maddelere verdiği zarar herkes tarafından çok iyi bilinmektedir. Ancak kontrollü bir radyasyon etkisinin yararlı bazı işlemler için kullanılıp kullanılmayacağı merak konusu olmuş ve çalışmalar sonucunda x-ışınları, Sintigrafi, Tomografi ve PET cihazları gibi dozu ayarlanmış radyasyon kaynakları ile çalışan araçların üretilmesi sağlanmıştır.

İyonize etme özelliğine sahip radyasyon, alfa, beta, gamma ve x-ışınlarıdır. Alfa ve beta ışınlarının parçacık, gamma ve x-ışınlarının ise elektromanyetik dalga özellikleri baskındır. Çekirdekten beta yayılımı, β^- , β^+ ve elektron kapma olarak üç şekilde olur. β^+ , elektronun anti parçacığıdır. Bir ortamda, anti madde olarak ortaya

çıkan pozitronun hedefle etkileşmesinin incelenmesi, medikal alanda kullanımlarının gittikçe artması nedeniyle, özellikle biyolojik hedeflerde son derecede önemlidir.

Pozitron, madde içinden geçerken, atomlarla elastik veya elastik olmayan çarpışmalar yapabilir. Elastik olmayan çarpışmalar esnasında, yüksek enerji kaybına uğrarsa ya da kuvvetli bir çekirdek alanından geçerken ani bir yön değişimi yaşarsa frenleme ışması (Bremsstrahlung) oluşur. Pozitron, ortamda ilerlerken kendi enerjisine hemen hemen eşit enerjide bir elektronla karşılaşır kararsız pozitronyum atomu oluşturur ve çok kısa bir süre sonucunda 511 keV enerjili zıt yönde iki adet gamma ışınına dönüşen yok olma işlemini gerçekleştirir.

Düşük ve orta enerjili pozitronlar için elastik ve elastik olmayan çarpışmalar en olası etkileşim türleridir. Ortamda ilerleyen pozitronun aldığı menzil hesaplanmak istenirse hem elastik hem de elastik olmayan çarpışma olaylarının gözlenmesi gerekir. Ancak pozitronun ortam içindeki enerji kaybına bakılmak istenirse, **elastik olmayan çarpışmalar** incelenmelidir. Elastik olmayan çarpışmalarda ortamdaki atomlar uyarılır ya da iyonize olurlar. İyonizasyon, etkileşime girilen atomdan bir elektron sökülmesi ve atomun yapısında iyonizasyon sayısı kadar yük değişimi olması demektir. Uyarılan ya da iyonize olan atom pozitronun da enerji kaybetmesine ve sonuçta yok olmasına neden olur. Ortamın bu işlevine hedefin **durdurma gücü** denir. Hedef maddenin durdurma gücü bilinirse radyasyondan korunmak için kullanılacak en iyi zırhlanma seçimi yapılabilir. Ya da biyolojik bir maddeye verilen radyasyonun ne kadar sürede zararsız hale geleceği yani etkisinin biteceği hakkında bilgi sahibi olunabilir.

Radyasyon-madde etkileşmesi fizikte çok parçacık etkileşmesi olarak görülür ki analitik çözümü çok zor olan problemlerdendir. Ortaya konulan böyle bir problem hem klasik hem de kuantum mekaniği açısından incelenmelidir. Farklı kısıtlamalar içeren çeşitli modeller kurulmuştur. A. Hans Bethe ve Felix Bloch (Bethe, 1930, Bloch, 1933), Born yaklaşımına dayalı analitik bir ifade türetmiş ve halen pek çok çalışmada kullanılmaktadır. Yarı-klasik bir çözüm, Michal Gryzinski tarafından önerilmiş ve halen bazı yayınlarda kullanıldığı görülmektedir (Gryzinski, 1964). Mitio Inokuti (Inokuti, 1971)'da genelleştirilmiş titreşken şiddeti (Generalized Oscillator Strengths – GOS) tanımı üzerine kurulu bir model önermiş ve yaygın olarak da kullanılmaktadır. Son yıllarda, önerilen bu modeller, radyasyon-madde etkileşmesinin doğasında rastgelelik

(stochastic) olması nedeni ile Monte Carlo Yöntemi kullanılarak bilgisayar aracılığıyla çözümlenmekte ve deneysel sonuçlara yakın sonuçlar elde edilmektedir. PENELOPE (PENetration and Energy LOSS of Positrons and Electrons) bu programlardan birisidir.

Durdurma gücü ile ilgili çalışmalar incelendiğinde, sonuçların özellikle düşük enerji bölgesinde uyumsuzluk gösterdiği anlaşılmaktadır. Analitik çözümlerin çoğu düşük enerji bölgesinde (<10 keV) durdurma gücü hesabı yapamamaktadır (Berger ve Seltzer, 1983), (ICRU Report 37, 1984).

Bu çalışmada Monte Carlo yöntemi ile düşük ve orta enerjili pozitronların ortamla etkileşmesi ve yok oluncaya kadarki süreçte yaptığı esnek ve esnek olmayan etkileşimlerin neler olduğu, bu etkileşimlerin hangi sıklıkta olduğu gözlenmiş, yine Monte Carlo yöntemi ile belli bir kinetik enerjideki pozitronların ortam tarafından durdurulmalarının hesabı yapılmıştır. Esnek çarpışmaların benzetişimi yapılırken ekranlanmış (screening) Rutherford saçılma formülü ve Wentzel tarafından türetilen ekranlama (screening) parametresi kullanılmıştır (Tökesi ve Mukoyama, 1994). Elastik olmayan çarpışmaların benzetişimi de Genelleştirilmiş Titreşken Gücüne dayalı M.Inokuti'nin (Inokuti, 1971) önerdiği, D.Liljequist (Liljequist, 1983, 1984) tarafından basitleştirilerek sunulan model kullanılarak yapılmıştır.

Esnek ya da esnek olmayan etkileşmeler sonucu etkileşime giren parçacıklar farklı açılarla saçılırlar. Saçılma açıları kullanılan benzetişim programıyla hesaplanabilirse de özellikle bileşikler için benzetişim yapılırken β^+ kaynağının hedefin içinde olduğu kabul edilmiş ve yayınlanan pozitron için yöneliş göz ardı edilmiştir.

Alüminyum, berilyum, silikon, bakır gibi elementler ile su, adenin, guanin, timin, sitozin gibi bileşikler için hesaplamalar yapılmıştır. Hesaplamalarda gereksinim duyulan söz konusu maddelere ait karakteristik rezonans enerjileri çeşitli yayınlardaki tablolardan alınmış ve bileşikler için toplama kuralları kullanılarak hesaplanmıştır.

BÖLÜM 2. TEMEL BİLGİLER

Saçılma olaylarında, temel olarak, saçılmadan önceki gelen parçacık sayısı ile saçılmadan sonraki saçılan parçacık sayısındaki değişim, gelen ve saçılan parçacıkların enerjisindeki değişim ve saçılan parçacıkların saçılma açıları ile ilgilenilir. Saçılma olaylarında bu değişimler diferansiyel tesir kesiti denilen matematiksel ifadelerle belirlenir. Diferansiyel tesir kesitinin tüm uygun açılar ya da enerji kayıpları üzerinden integre edilmesiyle de toplam diferansiyel tesir kesitleri elde edilmiş olur. Gelen parçacık ortamdan geçerken birden fazla saçılmaya uğruyorsa o zaman iki saçılma merkezi arasında aldığı mesafe de önemlidir ve bu mesafeye ortalama serbest yol (mean free path) denir.

Daha önce de sözünü ettiğimiz gibi pozitron-madde etkileşmesinde,

- Atomik elektronlarla elastik çarpışma,
- Atomik elektronlarla elastik olmayan çarpışma
- Çekirdekle etkileşmeden kaynaklanan frenleme ışınması (Bremsstrahlung)
- Yok olma işlemi

tipindeki etkileşmelerle karşılaşılır. Düşük ve orta enerjili pozitronlar için baskın etkileşme türü elastik çarpışma ile atomik uyarılmayı ve iyonizasyonu içeren elastik olmayan çarpışmalardır.

2.1. Elastik Çarpışma

Elastik çarpışma sonucunda etkileşmeye giren parçacıkların içyapılarında bir değişim olmazken hafif kütleli parçacığın hareket yönünde değişim gözlenir. Elastik çarpışma için Ekranlanmış (Screening) Rutherford saçılma formülü (diferansiyel tesir kesiti)

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{Z^2 e^4}{4E^2(1 - \cos\theta + 2\eta)^2} \quad (2.1)$$

şeklinde yazılır (Tökesi ve Mukoyama, 1994) ve burada Z , θ , e ve E sırasıyla atomik sayı, saçılma açısı, pozitronun yükü ve pozitron kinetik enerjisidir. Wentzel tarafından türetilen atomik ekranlama parametresi η

$$\eta = \frac{3.4 Z^{2/3}}{E} \quad (2.2)$$

şeklinde verilir (Tökesi ve Mukoyama, 1994). Pozitronun enerjisinin bir fonksiyonu olarak elastik saçılma toplam tesir kesiti, σ_e , (1) eşitliğinin olası tüm saçılma açıları üzerinden integre edilmesiyle

$$\sigma_e = \frac{\pi Z^2 e^4}{4E^2 \eta (\eta + 1)} \quad (2.3)$$

bulunur.

Bir pozitronun bir Ω katı açısı içine saçılmasının P_Ω olasılığı

$$P_\Omega = \frac{1}{\sigma_e} \int \frac{d\sigma_e}{d\Omega} d\Omega \quad (2.4)$$

dır. Burada (2.1) ifadesi ve katı açı tanımı kullanılarak

$$P_{\theta,\phi} = \frac{1}{\sigma_e} \int \frac{Z^2 e^4}{4E^2 (1 - \cos\theta + 2\eta)^2} \sin\theta d\theta d\phi$$

şeklinde yazılabilir ve

$$P_{\theta,\phi} = \frac{1}{\sigma_e} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\theta \frac{d\sigma_e(E, \theta)}{d\theta} \sin\theta d\theta$$

Bu integrali hesaplırsak θ açısına saçılma olasılığı

$$P_\theta = 2\pi \int_0^\theta \frac{\frac{Z^2 e^4}{4E^2 (1 - \cos\theta + 2\eta)^2}}{\frac{\pi Z^2 e^4}{4E^2 \eta (\eta + 1)}} \sin\theta d\theta = 2 \int_0^\theta \frac{\eta (\eta + 1) \sin\theta}{(1 - \cos\theta + 2\eta)^2} d\theta$$

$$P_\theta = \frac{(\eta + 1)(\cos\theta - 1)}{(\cos\theta - 1 - 2\eta)} \quad (2.5)$$

$$\cos\theta = 1 - \frac{2\eta P_\theta}{1 + \eta - P_\theta} \quad (2.6)$$

bulunur.

Tek bir elastik çarpışmanın θ saçılma açısı, P_θ olasılığı yerine düzgün dağılımlı bir rastgele sayı, $R_1 \in (0, 1)$, kullanımı vasıtasıyla belirlenebilir :

$$\cos\theta = 1 - \frac{2\eta R_1}{1 + \eta - R_1} \quad (2.7)$$

Elastik çarpışmadan sonra azimutal açı, seçilecek diğer bir rastgele sayı $R_2 \in (0, 1)$ ile belirlenir :

$$\phi = 2\pi R_2 \quad (2.8)$$

Elastik saçılmada λ_e ortalama serbest yol,

$$\lambda_e = \frac{A}{N_a \rho \sigma_e} \quad (cm) \quad (2.9)$$

şeklinde tanımlanır (Tökesi ve Mukoyama, 1994). Burada A, hedef maddenin atom ağırlığı (akb), N_a Avagadro sayısı ($6,023 \times 10^{23}$ atom/mol), ρ hedef maddenin yoğunluğu (g/cm^3), σ_e elastik saçılma tesir kesiti (cm^2).

2.2. Elastik Olmayan Çarpışmalar (Atomik Uyarılma – İyonizasyon)

Elastik olmayan etkileşmelerde gelen parçacığın hedef atoma aktaracağı enerjiye bağlı olarak atom temel seviyeden üst bir seviye uyarılacak ya da iyonize olacaktır. Aynı zamanda da gelen parçacık enerji kaybederek geliş yönünden farklı bir yönde hareket edecektir.

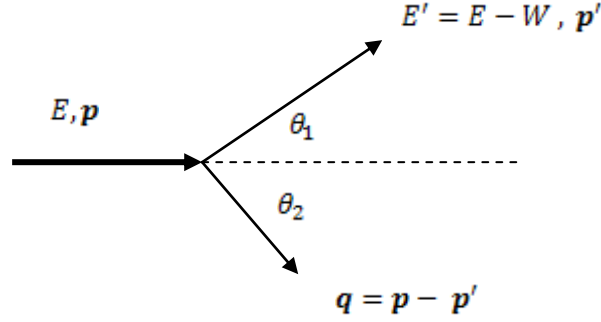
Pozitron - madde etkileşmesi için madde, homojen, amorf yapılı ve rastgele dağılmış atom ya da moleküllerden oluştuğu kabul edilerek modellenir. Yani gaz, sıvı ya da kristal yapılar göz önüne alınmaz. Etkileşim, tek parçacık etkileşmesi ile sınırlandırılır. Gelen pozitronun sadece tek bir atom ve söz konusu atomun da tek bir

parçacığı ile etkileştiği kabul edilir. Ayrıca etkileşime girilen atom ya da molekülün taban durumunda olduğu yani herhangi bir üst seviyeye uyarılmış durumda ya da iyonize durumda olmadığı kabul edilir. Bu kabul aynı zamanda eğer atom etkileşim sonucunda üst bir seviyeye uyarılacaksa bu izinli en üst seviye olacaktır, çünkü diğer alt seviyelerin hepsinin dolu olacağı daha baştan kabul edilmiş olur ve bu seviyeler geçişler için yasaktır.

Hedef madde bir element ya da bir bileşik olabilir. Eğer hedef madde element yani tek çeşit atomdan ibaret ise hedef maddenin atomik modellemesi, kuantum fiziğinden de iyi bilindiği üzere merkezinde bir çekirdeğin olduğu elektronlarının üst üste kabuklarda yer aldığı bir yapı olarak kabul edilir ve ana kabuklar ve alt kabuklar 1s, 2s 2p, ... şeklinde isimlendirilirler (Bayın, 1974). Bileşik tipindeki maddelerde ise bileşimi oluşturan maddelerin en dış kabuklarının toplamı dış kabuk (outer shell) ve diğerlerinin oluşturduğu kabuk da iç kabuk (inner shell) olarak isimlendirilir. Genel olarak son kabuk valans kabuğu olarak isimlendirilir (Lee vd, 1990, Akar, 2005).

Atomlar için her kabuğa ait W_i rezonans enerjisi değeri kullanılan hedef maddenin karakteristiğidir ve elastik olmayan etkileşmelerde önemlidir. Genel olarak atomlar için elektronların bağlanma enerjisinden bahsedilir. Ancak W_i rezonans enerjisinin bağlanma enerjisi ile karıştırılmaması gerekir. İyonizasyon enerjisi olarak da isimlendirilen bağlanma enerjisi, bir atom, molekül veya iyondan bir elektron koparmak için gerekli enerjidir. W_i rezonans enerjisi ise herhangi bir kabuktaki elektronun bir şekilde enerji aktararak izinli üst seviyeye geçebilmesi için gerekli enerji miktarıdır. Bileşik maddelerde gruplama genelde iç kabuk ve valans kabuğu şeklinde yapıldığından bileşiklerin W_i değerleri bileşimi meydana getiren elementlerin W_i değerleri kullanılarak hesaplanır. Hesaplama kuralları ve örneği 3. Bölümde verilecektir (Lee vd, 1990, Akar, 2005).

Elastik olmayan çarpışmaları klasik yaklaşımla anlatmak için aşağıdaki çarpışma şeması kullanılabilir (Taxiarchis, 2008):



Şekil 2.1 Pozitron – atomik elektron çarpışmasının şematik gösterimi

İlk olarak (E, \mathbf{p}) enerji ve momentumuna sahip bir pozitronun, başlangıçta serbest ve durgun bir elektron ile etkileşmesinde pozitron elektrona \mathbf{q} kadar bir momentum transfer eder ve W kadar da enerji kaybeder. Bu durumda, transfer edilen \mathbf{q} momentumuna karşılık gelen W enerji transferi tek değerlidir (Taxiarchis, 2008). Gelen pozitron da $\mathbf{p}' = \mathbf{p} - \mathbf{q}$ momentumu, $E' = E - W$ enerjisi ve θ_1 sapma açısıyla saçılır. Hedef elektron ise geri tepme enerjisi olarak adlandırılan Q enerjisine, \mathbf{q} momentumuna ve θ_2 sapma açısına sahip olur. Burada $Q = W$ 'dir ve

$$Q = \frac{q^2}{2m} \quad (2.10)$$

şeklinde verilir.

Ancak yukarıda ele alınan pozitron-elektron etkileşmesindeki elektronun bir atoma bağlı olduğu durumda \mathbf{q} momentum transferi tüm atoma yapılmış olacaktır. Burada elektron çekirdek çevresinde hareketli ve çekirdeğe bağlı olduğundan artık \mathbf{q} momentum transferine karşılık ele aldığımız elektronun kazanacağı W enerjisi **tek değerli olmayacaktır**(Taxiarchis, 2008). Bu tip olaylarda nicelikler rastgele değerler almakta ve belirli olasılık yoğunluk fonksiyonları aracılığıyla tanımlanmaktadırlar. Hesaplamalarda θ yerine Q geri tepme enerjisi kullanmak da benimsenmiştir ve

$$q^2 = p^2 + p'^2 - pp' \cos\theta \quad (2.11)$$

eşitliği kullanılmaktadır (Negreanu vd., 2005).

Yüklü parçacıklarla (elektron veya pozitron) atom veya molekül çarpışmalarında iki tip olay karşımıza çıkmaktadır. Birincisi, atomun elektronlarının yeterli enerjisi, gelen parçacıktan alarak atomdan kopması yani atomun iyonizasyonu, ikincisi, gelen yüklü parçacığın elektronlarla etkileşerek bunlara yeterli enerji aktarıp bu elektronları izinli üst seviyelere çıkarması yani atomun uyarılması durumudur (N.Bohr, 1948).

Elastik olmayan çarpışma durumunda atom başına diferansiyel tesir kesiti, enerji aktarımı W , “momentum aktarım enerjisi” Q olduğunda

$$\frac{d^2\sigma}{dQdW} = \frac{\pi e^4}{E} \frac{1}{WQ} \frac{df(W, Q)}{dW} \quad (2.12)$$

şeklinde verilir (M.Inokuti, 1971). Bu eşitlikteki

$$\frac{df(W, Q)}{dW} \quad (2.13)$$

genelleştirilmiş titreşken gücü yoğunludur. Bu nicelik elastik olmayan bir uyarılmada, verilen bir Q geri tepme enerjisi için, W ile $W+dW$ arasında enerji aktarımı yapılan bir atomdaki elektronların sayısı olarak kabul edilebilir. Yukarıda çarpışma şemasını açıklarken de belirtildiği gibi atom-pozitron etkileşmesi için verilen bu diferansiyel tesir kesiti eşitliğinde, verilen bir Q değerine karşılık W ya da W 'nin verilen bir değerine karşılık Q çeşitli değerler alabilir ve bu (Q, W) değerleri bir yüzey formu oluştururlar ki bu “Bethe yüzeyi” olarak adlandırılır (Fernandez-Vera, 1995). Hedefin karakteristik titreşkenlerinin uyarılmasına karşı gelen rezonans etkileşmesi, atomik durumda küçük momentum aktarımı ve bağlanma enerjisi mertebesinde enerji aktarımı ile optiksel izinli uyarılmaya karşı gelir. Büyük momentum transferi ile karakterize edilen ve $Q = W$ olarak alınan etkileşim ise serbest bir atomik elektronla pozitron etkileşmesi olarak varsayılır ve bu çarpışmanın ikili bir karakter taşıdığı kabul edilir.

Bu bilgiler ışığında diferansiyel tesir kesiti yeniden yazılırsa

$$\frac{d^2\sigma}{dQdW} = \frac{\pi e^4}{E} \frac{1}{WQ} \frac{df(W, Q)}{dW} \quad (2.14)$$

$$\frac{d^2\sigma}{dQdW} = \frac{\pi e^4}{E} \frac{1}{WQ} \sum_{i=1}^M f_i \frac{dg_i(W, Q)}{dW} \quad (2.15)$$

$$\frac{dg_i(W, Q)}{dW} = \begin{cases} \delta(W - W_i) & Q < W_i \\ \delta(W - Q) & Q > W_i \end{cases} \quad (2.16)$$

olur. Burada $\delta(x)$ Dirac Delta fonksiyonudur. Bu tesir kesiti ifadesi, rezonans benzeri ve serbest etkileşim koşullarına göre irdelenebilir.

***Rezonans** benzeri etkileşim için $Q < W_i$ ve $E > W_i$, W_i , i .nci kabuğun rezonans enerjisi, Dirac Delta fonksiyonunun özelliklerinden de yararlanarak

$$\frac{d^2\sigma}{dQdW} = \frac{\pi e^4}{E} \frac{1}{WQ} \sum_{i=1}^M f_i \frac{dg_i(W, Q)}{dW}$$

$$\frac{d\sigma_{Ri}}{dQ} = \frac{\pi e^4}{E} \int_{W_i}^E \frac{1}{WQ} f_i \delta(W - W_i) dW$$

$$\frac{d\sigma_{Ri}}{dQ} = \frac{\pi e^4}{E} f_i \frac{1}{W_i Q}$$

$$\sigma_{Ri} = \frac{\pi e^4}{E} f_i \int_{Q_{min}}^{Q_{max}} \frac{1}{W_i Q} dQ = \frac{\pi e^4}{E} f_i \int_{Q_{min}}^{W_i} \frac{1}{W_i Q} dQ$$

Burada $Q_{max} = W_i$ olarak alınır. Çünkü rezonans benzeri etkileşimde en büyük momentum transferi rezonans enerjisine eşit olmalıdır.

$$\sigma_{Ri} = \frac{\pi e^4}{E} f_i \frac{1}{W_i} \ln \left[\frac{W_i}{Q_{min}} \right] \quad (2.17)$$

olarak bulunur.

Bu tip etkileşmeden sonra saçılan pozitron için saçılma açısı

$$Q = 2E - W_i - 2\sqrt{E(E - W_i)} \cos\theta_1 \quad (2.18)$$

eşitliğinden hesaplanabilir. Bu durumda uyarılan elektron için bir saçılma açısı söz konusu olamaz.

***Serbest** etkileşim için $Q > W_i$ ve $Q > W$ olup, burada pozitron için göreceli olmayan Rutherford diferansiyel tesir kesiti kullanılarak (Salvat, 2003) serbest etkileşim toplam tesir kesiti

$$\begin{aligned}\frac{d\sigma_{Si}}{dW} &= \frac{\pi e^4}{E} f_i \frac{1}{W^2} \\ \sigma_{Si} &= \frac{\pi e^4}{E} f_i \int_{W_i}^E \frac{1}{W^2} dW \\ \sigma_{Si} &= \frac{\pi e^4}{E} f_i \left[\frac{E - W_i}{WW_i} \right]\end{aligned}\quad (2.19)$$

bulunur.

Etkileşmeye giren parçacık pozitron olduğu için integral üst sınırı E/2 yerine E olarak alınır (Negreanu, 2005).

Serbest çarpışma tipi etkileşmeden sonra saçılan pozitronun saçılma açısı

$$Q = 2E - W - 2\sqrt{E(E - W)}\cos\theta_1 \quad (2.20)$$

ve koparılan elektronun saçılma açısı da

$$Q = -W - 2\sqrt{EQ}\cos\theta_2 \quad (2.21)$$

eşitliklerinden hesaplanabilir.

f_i titreşken gücü olarak adlandırılır ki atom için her bir atomik elektronu temsil eder. Değeri ~ 1 dir ve boyutsuz bir niceliktir. Bethe toplama kuralı

$$\sum_{i=1}^M f_i = Z \quad (2.22)$$

şeklinde verilir ve Z atom sayısıdır (Liljequist, 1984). Ortalama iyonlaşma enerjisi I için

$$\sum_i^M f_i \ln W_i = Z \ln I \quad (2.23)$$

eşitliği kullanılır (Liljequist, 1984).

Moleküller için de benzer toplama kuralı vardır ve

$$\bar{f}_i = \frac{\sum_j N_j f_{ij}}{\sum_j N_j} \quad (2.24)$$

şeklinde verilir (Lee vd., 1990). Aynı şekilde moleküller için W_i rezonans enerjileri de

$$\ln \bar{W}_i = \frac{\sum_j N_{ij} Z_{ij} \ln W_{ij}}{\sum_j N_{ij} Z_{ij}} \quad (2.25)$$

eşitliği ile hesaplanır (Lee vd., 1990). Moleküllerin ortalama iyonizasyon enerjisi

$$\ln \bar{I} = \frac{\sum_j N_j Z_j \ln I_j}{\sum_j N_j Z_j} \quad (2.26)$$

eşitliğinden hesaplanabilir.

Atom içinde çeşitli kabuk ve alt kabukları i harfi ile indekslenebilir. Daha detaylandırmak istersek alt kabuklardaki elektronlara da indeksler vererek gruplandırmak olanaklıdır. Ancak basitlik açısından sadece alt kabuklar için indeks kullanılır ve W_i rezonans enerjisi ile belirlenmiş titreşken grubunun yoğunluğu $N f_i$ olarak alınır, tüm titreşkenler $i = 1$ ' den $i = M$ 'ye kadar etiketlenmiş olur.

Bu bilgiler ışığında ortalama serbest yolun tersi ve durdurma gücü eşitlikleri, rezonans benzeri etkileşimler için

$$\lambda_{Ri}^{-1} = \begin{cases} N \frac{\pi e^4}{E} \frac{1}{W_i} \ln \left(\frac{W_i}{Q_{min}} \right) & E > W_i \\ 0 & E < W_i \end{cases} \quad (2.27)$$

$$Q_{min} = (\sqrt{E - W_i} - \sqrt{E})^2 \quad (2.28)$$

$$S_{Ri} = \lambda_{Ri}^{-1} W_i \quad (2.29)$$

ve serbest etkileşimler için

$$\lambda_{Si}^{-1} = N \frac{\pi e^4}{E} \left[\frac{E - W_i}{W W_i} \right] \quad (2.30)$$

$$S_{Si} = \lambda_{Si}^{-1} W \quad (2.31)$$

yazılabilir. Burada N birim hacim başına atom veya molekül sayısıdır.

$$N = \frac{N_a \rho}{A} \quad (2.32)$$

Burada A, hedef maddenin atom ağırlığı (akb), N_a Avagadro sayısı ($6,023 \times 10^{23}$ atom/mol), ρ hedef maddenin yoğunluğudur (gr/cm^3).

Bu eşitlikleri kullanarak toplam elastik olmayan ortalama serbest yol ve durdurma gücü eşitlikleri

$$\lambda^{-1} = \sum_{i=1}^M f_i (\lambda_{Ri}^{-1} + \lambda_{Si}^{-1}) \quad (2.33)$$

$$S = \sum_{i=1}^M f_i (S_{Ri} + S_{Si}) \quad (2.34)$$

elde edilir (Liljequist, 1983).

BÖLÜM 3. BENZETİŞİM PROGRAMI ve AÇIKLAMALAR

3.1. Pozitron-Madde Etkileşmesi İçin Monte Carlo Algoritması

Yüklü parçacık - katı madde etkileşmesinde olaylar rastgelelik içerir. Yani gelen pozitronun, ortamın atomlarıyla ne şekilde etkileşeceğini belli olasılıkları vardır ve bazen yüksek olasılığa sahip etkileşme türü yerine çok daha küçük olasılıklı bir etkileşme türü gerçekleşebilir. Bu nedenle de bu olayları incelerken Monte Carlo algoritmasının kullanımı uygun olmaktadır.

Şimdi elastik ve elastik olmayan çarpışma etkileşmeleri göz önüne alınarak algoritma incelenmeye başlanabilir. Yukarıda hem elastik (E indisli) hem de elastik olmayan (EO indisli) etkileşmenin toplam tesir kesitleri verilmiştir. Bunların toplamı çarpışma toplam tesir kesitini (T indisli) verir.

$$\sigma_T = \sigma_E + \sigma_{EO} \quad (3.1)$$

Bu nicelikler yerine ortalama serbest yolun tersi

$$\lambda_T^{-1} = \lambda_E^{-1} + \lambda_{EO}^{-1} \quad (3.2)$$

de kullanılabilir.

Elastik olmayan çarpışma tesir kesiti de rezonans benzeri etkileşim (R) ile serbest etkileşim (S) toplam tesir kesitlerinin toplamı olarak yazılabilir.

$$\sigma_{EO} = \sigma_R + \sigma_S \quad \text{veya} \quad \lambda_{EO}^{-1} = \lambda_R^{-1} + \lambda_S^{-1} \quad (3.3)$$

Toplam çarpışma toplam tesir kesitini yeniden yazarsak

$$\sigma_T = \sigma_E + \sigma_R + \sigma_S \quad \text{veya} \quad \lambda_T^{-1} = \lambda_E^{-1} + \lambda_R^{-1} + \lambda_S^{-1} \quad (3.4)$$

olur.

Öncelikle etkileşmenin elastik mi elastik olmayan çarpışma etkileşmesi mi olduğuna karar vermek için

$$P_1 = \frac{\lambda_E^{-1}}{\lambda_T^{-1}} \quad (3.5)$$

eşitliği kullanılabilir ki bu bize σ_T toplam çarpışma tesir kesitine sahip bir olayda σ_E elastik tesir kesitine sahip bir etkileşmenin olasılığını (P_1) verir. Bu durumda bilgisayar aracılığıyla $0 < R_1 < 1$ aralığında, rastgele bir sayı üretip bu sayıyı P_1 ile karşılaştırarak, örneğin $P_1 < R_1$ olduğunda elastik etkileşime, $P_1 > R_1$ durumunda elastik olmayan etkileşmeye karar verilebilir.

Elastik bir etkileşme için karar verilirse, bu etkileşme tipinde enerji kaybı söz konusu olmadığından sadece pozitronun yön değişimi (1.9) eşitliğine göre hesaplanır. Eğer elastik olmayan çarpışma tipine karar verilirse, elastik olmayan etkileşmenin de rezonans benzeri bir etkileşme mi serbest etkileşme mi olduğuna karar verilmelidir. Bunun için de

$$P_2 = \frac{\lambda_R^{-1}}{\lambda_{EO}^{-1}} \quad (3.6)$$

eşitliği yardımıyla rezonans benzeri etkileşmenin olasılığı hesaplanır ve yine $0 < R_2 < 1$ koşullarına uyan rastgele bir sayı ile karşılaştırılarak $P_2 < R_2$ ise rezonans benzeri etkileşme olacağına, $P_2 > R_2$ ise serbest etkileşme tipi olacağına karar verilir. Sonra etkileşimin atomun hangi kabuktaki elektronu ile ya da modelin dili ile hangi δ titreşkenle olacağına karar vermelidir. Bu durumda da yine

$$P_{Rj} = \frac{\lambda_{Rj}^{-1}}{\lambda_R^{-1}} \quad (3.7)$$

veya

$$P_{Sj} = \frac{\lambda_{Sj}^{-1}}{\lambda_S^{-1}} \quad (3.8)$$

kullanılarak elde edilecek olasılık değerleri yine bilgisayar aracılığıyla belirlenecek yeni bir $0 < R_3 < 1$ rastgele sayısı ile karşılaştırılır. Ancak burada 2'den fazla seçenek çıkabileceğinden işlem biraz daha değişik yapılır. Burada genel bir gösterim kullanarak anlatılırsa

$$P_j = \frac{\lambda_j^{-1}}{\lambda^{-1}} \quad ; \quad \sum_{j=1}^M P_j = 1 \quad (3.9)$$

yazılabilir ve karar verirken

$$P_1 + P_2 + \dots + P_{j-1} \equiv A_{j-1} < R_3 < A_j \quad (3.10)$$

eşitliği kullanılabilir.

Gelen pozitronun elastik olmayan hangi tip ve hangi δ titreşkenle etkileşime gireceğine karar verildikten sonra yukarıda verilen tesir kesitleri kullanılarak ortalama serbest yol ve durdurma gücü hesaplanabilir.

Ortalama serbest yol, tesir kesitinin tersiyle orantılı olarak verilir. Ancak iki etkileşme arasında alınan yol, etkileşme olayının rastgelelik taşıması nedeni ile ortalamadan sapmalar gösterir ve $0 < R_4 < 1$ şeklinde bir rastgele sayı kullanılarak

$$\text{yol uzunluğu} = -\lambda \ln(1 - R_4) \quad (3.11)$$

şeklinde örneklenir. Yeteri kadar çok sayıda yapılan örneklemelerin sonuçlarından elde edilen ortalama sonuç ise λ değerine yakınsar.

Benzetişim esnasında pozitronun enerji kaybı örneklenirken rezonans tipi etkileşmede, hedef maddenin atomik ya da moleküler yapısına bağlı olarak kuantum fiziği kurallarına göre belirlenen enerji seviyeleri arasındaki fark olarak örneklenir. Atom ya da molekül taban durumunda olduğundan uyarılma, boş olan en üst enerji seviyesine olacaktır. Serbest tip etkileşimde ise enerji kaybı örnekleme iyonize olan elektronun iyonizasyon enerjisi artı kinetik enerjisi olarak belirlenir ki bu durumda iyonize olan her bir elektrona aktarılan kinetik enerjideki farklılık pozitronun enerji kaybının da farklı farklı olmasına neden olur. Etkileşime girilen elektrona aktarılabilecek en büyük enerji pozitronun sahip olduğu kinetik enerjidir. Serbest tip etkileşmenin çok kez yinelenmesi sonucu elde edilecek olan enerji kaybı değerlerinin ortalaması da belli bir değere örneğin W_{ort} 'ya sağdan ya da soldan yakınsar.

Hedef maddenin durdurma gücü S, pozitronun iki etkileşme arasında aldığı yol başına kaybettiği enerji olarak tanımlanır. Ancak bu nicelik bir ortalama değerdir ki iki etkileşme arasında alınan yol ve etkileşme esnasında kaybedilen enerji miktarının ortalama değerlerinin birbirine bölümü ile hesaplanır.

$$\langle S \rangle = \frac{E_{ort}}{\lambda_{ort}} \quad (3.12)$$

Ayrıca, Monte Carlo algoritmasında kullanılan rastgele sayıların rastgeleliği benzetişimin gerçeğe uygun sonuçlar vermesi açısından çok önemlidir. Rastgeleliğin test edilmesi için bir çok test vardır: Frekans Testi, Seri Testi, Aralık Testi, Poker Testi vb.. Bu testleri sağlayan bir rastgele sayı üreticinin ürettiği rastgele sayıların benzetişim programında kullanılması ilk koşuldur.

3.2. Hedef Maddenin Modellenmesinde Kullanılan Nicelikler ve Hesaplanmaları

Yukarıda anlatılan algoritma kullanılırken pozitronun etkileşime gireceği ortamın özelliklerini tanımlayan atom ağırlığı, atom numarası, yoğunluk gibi maddesel özelliklerle, atomik oluşumun modellenmesinde kullanılan atom kabuk yapısı, kabukların rezonans enerjileri vb. bilgilerin verilmesi ya da uygun işlemler ile hesaplanması gerekmektedir. Özellikle de bileşik maddeler için molekül ağırlığı, molekül kabuk rezonans enerjisi, molekül kabuk osilatör şiddetlerinin hesaplanması gerekmektedir.

3.2.1. Element Hedefler

Benzetışimde kullanılacak element hedeflere ait gerekli bilgiler aşağıdaki tablolarda verilmiştir.

Tablo 3.1 Atom özellikleri (Ilgım, 1976)

Atom Adı	Atom Numarası	Atom Ağırlığı (akb)	Yoğunluğu (g/cm ³)
Berilyum (Be)	4	9,012186	1,850
Alüminyum (Al)	13	26,981539	2,702
Silikon (Si)	14	27,976930	2,420
Bakır (Cu)	29	62,929592	8,920

Tablo 3.2. Atom genelleştirilmiş titreşken şiddetleri

Atom Adı	Kabuk Sayısı	f ₁	f ₂	f ₃	f ₄	f ₅	f ₆
Berylyum (Be)	2	2	2				
Alüminyum (Al)	4	2	2	6	3		
Silikon (Si)	4	2	2	6	4		
Bakır (Cu)	6	2	2	6	2	6	11

Tablo 3.3. Atom rezonans enerjileri (eV) (Liljequist, 1983)

Atom Adı	Kabuk Sayısı	W ₁	W ₂	W ₃	W ₄	W ₅	W ₆
Berylyum (Be)	2	208	18,5	-	-	-	-
Alüminyum (Al)	4	3142	238	148	15,8	-	-
Silikon (Si)	4	3810	308	206	16,6	-	-
Bakır (Cu)	6	17197	2099	1794	230	142	50

3.2.2 Bileşik Madde Hedefler ve Karakteristik Özelliklerinin Hesaplanması

Yukarıda söz edildiği gibi bileşik maddelerin f_i , W_i ve I iyonizasyon değerlerini elde etmek için

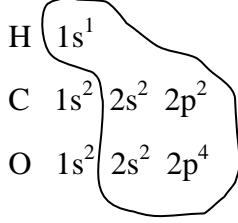
$$\bar{f}_i = \frac{\sum_j N_j f_{ij}}{\sum_j N_j} \quad (3.13)$$

$$\ln \bar{W}_i = \frac{\sum_j N_{ij} Z_{ij} \ln W_{ij}}{\sum_j N_{ij} Z_{ij}} \quad (3.14)$$

$$\ln \bar{I} = \frac{\sum_j N_j Z_j \ln I_j}{\sum_j N_j Z_j} \quad (3.15)$$

eşitlikleri kullanılır.

Hesaplamaların nasıl yapılacağı bir örnekle açıklanabilir. Polymethylmethacrylate (PMMA - $C_5H_8O_2$) bileşiği için öncelikle her bileşen atomun atomik konfigürasyonu yazılır.



Bu konfigürasyonlara bakılırsa, iç kabuklar sadece C ve O atomu için geçerlidir, H tek elektrona sahiptir ve bu dış elektron olarak kabul edilir. Buna göre

$$\text{iç kabuk için } \bar{f}_1 = \frac{0 * 8 + 2 * 5 + 2 * 2}{8 + 5 + 2} = \frac{14}{15} = 0,93$$

$$\text{dış kabuk için } \bar{f}_2 = \frac{1 * 8 + 4 * 5 + 6 * 2}{8 + 5 + 2} = \frac{40}{15} = 2,67$$

bulunur. Burada görüleceği üzere $0,93 + 2,67 = 3,60$ bulunur ki bu bize moleküldeki toplam elektron sayısını vermez. Ancak elektronların iç kabuklarla dış kabuklar arasında hangi oranda dağıldığını verir. Buna göre bu molekülün toplam elektron sayısı 15 olduğuna göre

$$f_1 = \frac{15,00}{3,60} * 0,93 = 3,875$$

$$f_2 = \frac{15,00}{3,60} * 2,67 = 11,125$$

$$f_1 + f_2 = 3,875 + 11,125 = 15 = Z_{\text{molekül}}$$

bulunur.

Tablo 3.4. Bileşiklerin hesaplanmasında kullanılan bazı atomların rezonans enerjileri
(Akar, 2005)

Atom	$W_{iç}$ (eV)	$W_{dış}$ (eV)
H (Hidrojen)	-	19,19
C (Karbon)	705,23	34,61
O (Oksijen)	898,54	51,58
N (Nitrojen)	941,14	41,077

İç ve dış kabuk için rezonans enerjilerini hesaplamak için Tablo 3.4'deki değerler kullanılırsa

$$\ln \bar{W}_i = \frac{N_1 Z_1 \ln W_1 + N_2 Z_2 \ln W_2 + N_3 Z_3 \ln W_3}{N_1 Z_1 + N_2 Z_2 + N_3 Z_3} \quad (3.16)$$

$$\ln \bar{W}_{iç} = \frac{(8 * 0 * \ln(19,19)) + (5 * 4 * \ln(705,23)) + (2 * 6 * \ln(898,54))}{(8 * 0 + 5 * 2 + 2 * 2)}$$

$$\ln \bar{W}_{iç} = \frac{92,7883}{14}$$

$$\bar{W}_{iç} = 755,77 \text{ eV}$$

$$\ln \bar{W}_{dış} = \frac{(8 * 1 * \ln(19,19)) + (5 * 4 * \ln(34,163)) + (2 * 6 * \ln(51,58))}{(8 * 1 + 5 * 4 + 2 * 6)}$$

$$\ln \bar{W}_{dış} = \frac{141,5756}{40}$$

$$\bar{W}_{dış} = 34,45 \text{ eV}$$

olarak bulunur. (Lee vd., 1990) makalesinde Tablo 3.4'de PMMA K seviyesi için 758eV, L seviyesi için 28eV verilmektedir. Buradaki hesaplamalarla karşılaştırılırsa yaklaşık eşit olduğu görülür.

Bu değerler kullanarak PMMA ($C_5H_8O_2$) için ortalama iyonizasyon enerjisi hesaplanırsa

$$\ln \bar{I} = \frac{\sum_j N_j Z_j \ln I_j}{\sum_j N_j Z_j} \quad (3.17)$$

$$\ln \bar{I} = \frac{5 * 6 * \ln 78 + 8 * 1 * \ln 19,20 + 2 * 8 * \ln 95}{5 * 6 + 8 * 1 + 2 * 8}$$

$$I = 67,2eV$$

olarak bulunur. Burada Hidrojen için $I_H = 19,20eV$, Karbon için $I_C = 78eV$ ve Oksijen için $I_O = 95eV$ ortalama iyonlaşma enerjisi değerleri PEGS4 tablolarından alınmıştır. Bulunan bu değer yine (Lee, vd., 1990) makalesindeki $I=65,6eV$ değeri ile karşılaştırıldığında yaklaşık eşit olduğu görülür.

Benzetişimde hedef olarak kullanılan bileşikler için hesaplanan molekül ağırlığı, genelleştirilmiş titreşken şiddetleri (f) ve rezonans enerjilerine (W) ait sonuçlar aşağıda tablo halinde verilmiştir.

Tablo 3.5. Benzetişim programında hedef olarak kullanılan bileşik maddelere ait hesaplanan karakteristik değerler

Molekül Adı	Molekül ağırlığı	Kabuk sayısı	f ₁	f ₂	W _i (eV)	W _v (eV)
Su	18,0105	2	0,666667	2,66667	898,54	40,283
Guanin	151,0491	2	1,375000	3,50000	821,98	36,82
Adenin	135,0541	2	1,333333	3,33333	814,69	35,36
Sitozin	111,0431	2	1,230770	3,23077	809,99	36,13
Timin	126,0428	2	1,200000	3,20000	793,52	36,61

3.2.3 Bileşik Madde Hedeflerin Karakteristik Özelliklerini Hesaplayan Program

Yukarıda Tablo 3.5'de verilen değerleri hesaplayan programın C# kodları ve ekran görüntüsü aşağıda verilmiş olup bu program sadece Hidrojen (H), Karbon (C), Nitrojen (N), Oksijen (O) ve Fosfor (P) elementlerinden oluşan bileşikler için hesaplama yapmaktadır.

```

using System;
using System.Collections.Generic;
using System.ComponentModel;
using System.Data;
using System.Drawing;
using System.Linq;
using System.Text;
using System.Windows.Forms;
using System.Data.SqlClient;

namespace MC_PME_1
{
    public partial class Form4 : Form
    {
        double hx = 0.0, cy = 0.0, nw = 0.0, oz = 0.0, pt = 0.0;

        double hf1 = 0.0, hf2 = 0.0, hf3 = 1.0;
        double cf1 = 2.0, cf2 = 0.0, cf3 = 4.0;
        double nf1 = 2.0, nf2 = 0.0, nf3 = 5.0;
        double of1 = 2.0, of2 = 0.0, of3 = 6.0;
        double pf1 = 2.0, pf2 = 8.0, pf3 = 5.0;

        double hw1 = 1.0, hw2 = 1.0, hw3 = 19.19;
        double cw1 = 705.23, cw2 = 1.0, cw3 = 34.163;
        double nw1 = 941.14, nw2 = 1.0, nw3 = 41.077;
        double ow1 = 898.54, ow2 = 1.0, ow3 = 51.58;
        double pw1 = 4406.5, pw2 = 388.17, pw3 = 31.11;

        double ih = 19.19, ic = 78.0, inn = 82.0, io = 95.0, ip = 173.0;
//iyonizasyon//
        double ib;
        double zh = 1.0, zc = 6.0, zn = 7.0, zo = 8.0, zp = 15.0; //atom
numarası//
        double ah = 1.007825, ac = 12.0000, an = 14.0030074, ao = 15.994914, ap =
30.973735; //atom ağırlığı//

        double fv, fk, fl, f4, f5;
        double wv, wk, wl;
        double ewv, ewk, ewl, ew4, ew5;
        double bno, bma, bmy, bks; //bileşik no, molekül ağırlığı,
yoğunluğu, kabuk sayısı//
        string ba; //bileşik adı //

        double payda1, payda2, payda3;

        public Form4()
        {
            InitializeComponent();
        }

        private void button1_Click(object sender, EventArgs e)
        {
            hx = double.Parse(textBox1.Text);
            cy = double.Parse(textBox2.Text);
            nw = double.Parse(textBox3.Text);
            oz = double.Parse(textBox4.Text);
            pt = double.Parse(textBox5.Text);
        }
    }
}

```



```

        fk = (hx * hf1 + cy * cf1 + nw * nf1 + oz * of1 + pt * pf1) / (hx +
cy + nw + oz + pt);
        fl = (hx * hf2 + cy * cf2 + nw * nf2 + oz * of2 + pt * pf2) / (hx +
cy + nw + oz + pt);
        fv = (hx * hf3 + cy * cf3 + nw * nf3 + oz * of3 + pt * pf3) / (hx +
cy + nw + oz + pt);

        label17.Text = Convert.ToString(fk);
        label19.Text = Convert.ToString(fl);
        label111.Text = Convert.ToString(fv);

        payda1 = (hx * hf1 + cy * cf1 + nw * nf1 + oz * of1 + pt * pf1);
        payda2 = (hx * hf2 + cy * cf2 + nw * nf2 + oz * of2 + pt * pf2);
        payda3 = (hx * hf3 + cy * cf3 + nw * nf3 + oz * of3 + pt * pf3);

        if (payda1 != 0)
        {
            wk = (hx * hf1 * Math.Log(hw1) + cy * cf1 * Math.Log(cw1) + nw *
nf1 * Math.Log(nw1) + oz * of1 * Math.Log(ow1) + pt * pf1 * Math.Log(pw1)) / (hx
* hf1 + cy * cf1 + nw * nf1 + oz * of1 + pt * pf1);
            ewk = Math.Exp(wk);
        }
        else
        {
            ewk = 0;
        }
        if (payda2 != 0)
        {
            w1 = (hx * hf2 * Math.Log(hw2) + cy * cf2 * Math.Log(cw2) + nw *
nf2 * Math.Log(nw2) + oz * of2 * Math.Log(ow2) + pt * pf2 * Math.Log(pw2)) / (hx
* hf2 + cy * cf2 + nw * nf2 + oz * of2 + pt * pf2);
            ew1 = Math.Exp(w1);
        }
        else
        {
            ew1 = 0;
        }
        if (payda3 != 0)
        {
            wv = (hx * hf3 * Math.Log(hw3) + cy * cf3 * Math.Log(cw3) + nw *
nf3 * Math.Log(nw3) + oz * of3 * Math.Log(ow3) + pt * pf3 * Math.Log(pw3)) / (hx
* hf3 + cy * cf3 + nw * nf3 + oz * of3 + pt * pf3);
            ewv = Math.Exp(wv);
        }
        else
        {
            ewv = 0;
        }

        ib = Math.Exp((hx * zh * Math.Log(ih) + cy * zc * Math.Log(ic) + nw *
zn * Math.Log(inn) + oz * zo * Math.Log(io) + pt * zp * Math.Log(ip)) / (hx * zh
+ cy * zc + nw * zn + oz * zo + pt * zp));

        label113.Text = Convert.ToString(ewk);
        label115.Text = Convert.ToString(ew1);
        label117.Text = Convert.ToString(ewv);

        label21.Text = Convert.ToString(ib);

        bma = hx * ah + cy * ac + nw * an + oz * ao + pt * ap;
        label25.Text = Convert.ToString(bma);
    }

private void button2_Click(object sender, EventArgs e)
{
    bno = double.Parse(textBox6.Text);
    ba = Convert.ToString(textBox7.Text);
    bmy = double.Parse(textBox8.Text);
    bks = double.Parse(textBox9.Text);
    ew4 = 0.0; ew5 = 0.0; f4 = 0.0; f5 = 0.0;

    if (f1 == 0.0) { f1 = fv; fv = 0.0; }

```

```

if (ew1 == 0.0) { ew1 = wv; ewv = 0.0; }

SqlConnection conn = new SqlConnection("Data
Source=AC1\\SQLEXPRESS;Initial Catalog=" + Form1.db_bilgi + ";Integrated
Security=True");
conn.Open();
SqlCommand cmd1 = new SqlCommand("INSERT INTO Bilesik (No, Adı,
[Molekül Ağırlığı], Yoğunluk, [Kabuk Sayısı], F1, F2, F3, F4, F5, W1, W2, W3, W4,
W5) VALUES ('" + bno + "','" + ba + "','" + bma + "','" + bmy + "','" + bks +
 "','" + fk + "','" + fl + "','" + fv + "','" + f4 + "','" + f5 + "','" + ewk +
 "','" + ewl + "','" + ewv + "','" + ew4 + "','" + ew5 + "')", conn);
cmd1.ExecuteNonQuery();

conn.Close();
conn.Dispose();
}
}
}

```

Pozitronun Madde ile Etkileşiminin Benzetimi

İlk İşlemler Ön Hesaplamalar Benzetişim İşlemleri Raporlama İşlemleri Çıkış

Bileşiklerin W ve f, I, Moleküler Ağırlık Değerlerinin Hesaplanması

Bu Modül sadece H, C, N, O ve P içerikli bileşikler hesaplar ve dosyaya kaydeder

No: 1

Molekül Adı: PMMA

Yoğunluk: 1

Kabuk Sayısı: 2

Hidrojen H: 8

Karbon C: 5

Nitrojen N: 0

Oksijen O: 2

Fosfor P: 0

Bileşiğin f Değerleri

f (i1): 0,933333333333333

f (i2): 0

f (v): 2,66666666666667

Bileşiğin Rezonans Enerji(eV) Değerleri

W (i1): 755,770293870394

W (i2): 0

W (v): 34,4458889209736

Bileşiğin Ortalama İyonizasyonu (eV)

İyonizasyon: 67,1801592423038

Bileşiğin Molekül Ağırlığı

Molekül Ağırlığı: 100,052428

Hesapla

Dosyaya Kaydet

Şekil 3.1 Bileşik madde hedeflerin karakteristik özelliklerini hesaplayan programın örnek ekran görüntüsü

3.3. Benzetiřim İin Kullanılan Program (C#) ve Ekran Gruntüsü

```

public void hesaplama()
{
    E = Convert.ToDouble(Form3.EE);
    Z = Convert.ToDouble(Form3.ZZ);
    A = Convert.ToDouble(Form3.AA);
    RO = Convert.ToDouble(Form3.R00);
    M = Form3.MM;

    dosyadan_fw_oku(); //Elementler iin f, W ve I deęerleri okunuyor//
    EE_Karsilastirma = Double.Parse(textBox7.Text);

    Random rnd = new Random();

    for (K = 1; K < 180000; K++)
    {
        if (E < EE_Karsilastirma) { goto ZZZ; }

// ** Toplam Elastik Tesir Kesiti -----**//
// ** Ekranlanlama Parametresi - Screening parameter(boyutsuz) -----**//
        ETA = ((3.4) * Math.Pow(Z, 2.0 / 3.0)) / (E);
        TETK = (Z * Z * (6.51E-14)) / (4.0 * E * E * ETA * (ETA + 1.0));

//** Tesir Kesidi sıfırlama -----**//
        TIRTK = 0; TIFTK = 0;
        for (KS = 1; KS <= M; KS++)
        { IRTK[KS] = 0.0; IFTK[KS] = 0.0; }

//** Q<WI E>WI iin Rezonans Toplam Inelastik Tesir Kesidi -----**//
        for (KS = 1; KS <= M; KS++)
        {
            if (E < WI[KS])
            { TIRTK = TIRTK + 0.0; }
            else
            {
                IRTK[KS] = ((6.51E-14) / E) * (1.0 / WI[KS]) * (Math.Log(WI[KS] /
                    (Math.Pow((Math.Sqrt(E - WI[KS]) - Math.Sqrt(E)), 2.0))));
                TIRTK = TIRTK + F[KS] * IRTK[KS];
            }
        }

//** Q>WI Q=W iin Serbest Toplam Inelastik Tesir Kesidi -----**//
        for (KS = 1; KS <= M; KS++)
        {
            if (E < WI[KS])
            { TIFTK = TIFTK + 0.0; }
            else
            {
                IFTK[KS] = (6.51E-14) * (1.0 / E) * ((E - WI[KS]) / (E * WI[KS]));
                TIFTK = TIFTK + F[KS] * IFTK[KS];
            }
        }

//** Positron Yok Olması Toplam Tesir Kesidi -----**//
        GAMA = 1 + (E / (ME * C * C * 6.24E+11));
        TYOTK = ((3.14 * RE * RE) / ((GAMA + 1) * (GAMA * GAMA - 1))) * ((GAMA * GAMA +
            4 * GAMA + 1) * Math.Log(GAMA + Math.Sqrt(GAMA * GAMA - 1)) - (3 + GAMA))

```

```

        * Math.Sqrt(GAMA * GAMA - 1));
TITK = TIFTK + TIRTK; TTK = TITK + TETK + TYOTK;

/** Olasılıklar -----**/
PE = TETK / TTK; PI = TITK / TTK; PY = TYOTK / TTK; PT = PI + PE + PY;
PIRR = TIRTK / TITK; PIFF = TIFTK / TITK; PIT = PIRR + PIFF;

for (KS = 1; KS <= M; KS++)
{
    PIR[KS] = (F[KS] * IRTK[KS]) / TIRTK;
    PIF[KS] = (F[KS] * IFTK[KS]) / TIFTK;
    PIRT[KS] = PIRT[KS - 1] + PIR[KS];
    PIPT[KS] = PIPT[KS - 1] + PIF[KS];
}

/** Ortalama Serbest Yol Sıfırlaması -----**/

T_MFP = 0.0; MFP_E = 0.0; MFP_IR = 0.0; MFP_IF = 0.0;
LE = 0.0; LR = 0.0; LF = 0.0;
S = 0.0; SR = 0.0; SF = 0.0;
FSR = 0.0; FSF = 0.0;

/** Etkileşme Kararı (Elastik - Inelastik) -----**/
YYY:
R2 = (rnd.NextDouble());
if (PE > R2)
{
    R22 = (rnd.NextDouble());
    EL = EL + 1;
    MFP_E = A / (6.023E+23 * RO * TETK); //GENEL YAZIM//
    LE = -MFP_E * Math.Log(R22);
    TETA_E = Math.Acos(1.0 - ((2.0 * ETA * R22) / (1.0 + ETA - R22)));
}
else
{
/** Rezonans Benzeri ve Serbest etkileşme Kararı -----**/
R3 = (rnd.NextDouble());
if (PIRR > R3)
{
/** Rezonans Benzeri Etkileşme **/
R4 = (rnd.NextDouble());
for (L1 = 1; L1 <= M; L1++)
{
    if (PIRT[L1] > R4)
    {
        R5 = (rnd.NextDouble());
        Q = R5 * WI[L1];
        Qmin = Math.Pow((Math.Sqrt(E - WI[L1]) - Math.Sqrt(E)), 2.0);
        W = WI[L1];
        if (Q < Qmin | W > (E))
        { W = 0.0; // hatalı hesaplanan W'nin sıfırlanması // goto YYY; }

R55 = (rnd.NextDouble());
N = (Na * RO / A);
MFP_IR = 1 / (N * IRTK[L1]); //GENEL YAZIM//
LR = -MFP_IR * Math.Log(R55);
TETA_R = Math.Acos((2.0 * E - WI[L1]) / (2.0 * Math.Sqrt(E * (E - (WI[L1] -
Q)))))) * 180.0 / Math.PI;
goto RRR;
}
}
}
}
}

```

```

    }
}
RRR:
INR = INR + 1;
}
else
{
/** Serbest Etkileşme Enerji Kaybı Örneklenmesi-----**//
R9 = (rnd.NextDouble());
for (L2 = 1; L2 <= M; L2++)
{
if (PIFT[L2] > R9)
{
R10 = (rnd.NextDouble());
ZETA = (E * WI[L2]) / (E - WI[L2]);
W = (ZETA * WI[L2]) / (ZETA - R10 * WI[L2]);
if (W < WI[L2] | W > E)
{ W = 0.0; // hatalı hesaplanan W'nin sıfırlanması // goto YYY; }
R110 = (rnd.NextDouble());
N = (Na * RO / A);
MFP_IF = 1 / (N * IFTK[L2]); //GENEL YAZIM//
LF = -MFP_IF * Math.Log(R110);
TETAF = Math.Acos((E - W) / (Math.Sqrt(E * (E - W)))) * 180.0 / Math.PI;
goto FFF;
}
}
FFF:
INF = INF + 1;
}
IN = IN + 1;
}

WT = WT + W;
E = E - W;
W = 0.0;
TMFP_E = TMFP_E + LE; TMFP_IR = TMFP_IR + LR; TMFP_IF = TMFP_IF + LF;
TS_IR = TS_IR + FSR; TS_IF = TS_IF + FSF;

/** Döngü Bitişi -----**//
}
ZZZ:

/** Buton Bitişi -----**//
}

```

Benzetişim Hesaplama İşlemleri

Deney Bilgi Girişi

Adı
Alüminyum

Atom - Molekül No
13

Atom - Molekül Ağırlığı
26,9815

Yoğunluğu
2,702

Kabuk Sayısı
4

Parçacığın Geliş Enerjisi (eV)
5000

Parçacığın Kesilim Enerjisi (eV)

Yapılacak Deney Sayısı
10000

DosyaAdı	DS
AL20000	40000
AL10000	30000
AL8000	15000
AL5000	15000
AL3000	15000
AL1000	15000
AL500	15000
AL300	15000
AL200	15000
AL100	15000
AL80	15000
AL50	15000
AL30	15000
AL17	15000
*	

Kayıt Yapılacak Dosya Adları

Sonuçlar Dosyası
AL5000

İlk Hesaplamalar Dosyası
TKAL5000

Deney Başlat

Şekil 3.2 Benzetişim için kullanılan programın örnek ekran görüntüsü

3.4. Örnek Olarak Alüminyum Atomu ile Pozitron Etkileşmesinin İncelenmesi

Şimdiye kadar kuramsal olarak anlatılanlar alüminyum ortamında hareket eden bir pozitron ile incelenebilir. Etkileşim ortamı alüminyum olduğuna göre alüminyum atomunun özellikleri göz önüne alınmalıdır.

* Atom ağırlığı 26,9815 akb, atom numarası $Z=13$, yoğunluğu $2,702 \text{ gr/cm}^3$.

* Atom yapısı $1s^2, 2s^22p^6, 3s^23p^1$ şeklinde olup iç kabuklar 1s, 2s, 2p, valans kabuğu 3s3p olarak kabul edilir.

* Bu kabuklara karşı gelen rezonans enerjileri :

1s	$W_1=3142,0 \text{ eV}$
2s	$W_2= 238,0 \text{ eV}$
2p	$W_3= 148,0 \text{ eV}$
3s3p	$W_4= 15,8 \text{ eV}$

* Bu kabuklara karşı gelen GOS değerleri :

1s	$f_1 = 2$
2s	$f_2 = 2$
2p	$f_3 = 6$
3s3p	$f_4 = 3$

* Gelen pozitronun kinetik enerjisi 10.000 eV

Öncelikle rezonans tipi etkileşme, gelen pozitronun enerjisine bağlı olarak incelemeye başlanabilir. Rezonans tipi etkileşmenin toplam tesir kesiti

$$\lambda_{Ri}^{-1} = \begin{cases} N \frac{\pi e^4}{E} \frac{1}{W_i} \ln \left(\frac{W_i}{Q_{min}} \right) & E > W_i \\ 0 & E < W_i \end{cases}$$

şeklinde verilir. Ortam atomlarının taban durumunda oldukları kabul edilir. Yukarıdaki bağıntıya bakıldığında ve ortam değerleri ile karşılaştırma yapıldığında bu pozitronun tüm kabuklardaki elektronlarla etkileşmeye girebileceği ve bu kabukların rezonans enerjilerine eşit bir enerji aktarımında bulunabileceği yani bu miktar kadar enerji kaybedebileceği görülür. Ancak yine tesir kesiti her kabuk için ayrı ayrı hesaplandığında görülecektir ki yüksek rezonans enerji değerli kabuklarla etkileşime

girme olasılığı, daha düşük rezonans enerji değerli kabuklarla etkileşime girme olasılığından daha küçüktür. Burada ilginç olan ve daha önce de söz edilen olay, rezonansa gelen yani uyarılan elektronun aynı zamanda alması gereken momentumun küçük bir kesrini alıp kalan kısmını da atomun soğurmasıdır. Bu nedenle rezonans tipi etkileşimde pozitronun kaybedeceği enerji miktarı kuantumlu olmasına karşın aktarılan enerjiye karşılık gelen momentumun, uyarılan elektrona aktarılan miktarı kinematik olarak hesaplanan bir alt değere sahiptir ve değeri

$$Q_{min} = (\sqrt{E - W_j} - \sqrt{E})^2$$

şeklinde verilir(Liljequist, 1983).

Birkaç etkileşmeden sonra pozitronun kinetik enerjisinin 200eV civarına düştüğü varsayılırsa, bu durumda artık pozitronumuzun 1s ve 2s kabukları ile etkileşmesi söz konusu olamaz ve bu nedenle de yukarıdaki tesir kesiti hesabında 1s ve 2s kabuklarından katkı 0 olup, 2p ve 3s3p kabuklarından katkı gelecektir. Bu da pozitronumuzun artık bu tip bir etkileşimde en fazla 148,0eV ve en az da 15,8eV enerji kaybedeceğini gösterir. Buradan gördüğümüz asıl durum eğer pozitronun enerjisi 15,8eV'in altına düştüğünde artık ortamla rezonans tipi elastik olmayan çarpışma etkileşmesi yapamayacaktır.

Rezonans tipi etkileşme sonucu uyarılan elektronlar çeşitli yollarla temel seviyelerine indiklerinde ortama uygun frekanslı fotonlar salacaklardır. Bu da yeni etkileşmelere ancak foton etkileşmelerine neden olacaktır.

Pozitronlar hedef ile serbest etkileşme olarak nitelendirilen elastik olmayan çarpışma tipi etkileşmeye girdiklerinde, bu tip etkileşme için toplam tesir kesiti

$$\lambda_{si}^{-1} = N \frac{\pi e^4}{E} \left[\frac{E - W_i}{W W_i} \right]$$

şeklinde verilir. Bu etkileşme tipinde pozitron atomik elektronla etkileştiğinde ona en az iyonlaştırabileceği kadar bir enerji aktarması gerekmektedir ve aynı zamanda da bu enerji karşılığı kadar momentumun tamamı da bu atomik elektrona aktarılır ve onun kinetik enerji kazanması sağlanır. Ancak bu aktarılan enerjinin üst değeri pozitronun kinetik enerjisi ile sınırlıdır. Bu nedenle de olay rastgelelik içerir. Ama yüksek değerli

enerji aktarım olasılığı düşüktür. Sonuçta atom iyonize olur, ortama serbest elektron aktarılmış olur. Yine pozitron elastik olmayan etkileşimleri sonucunda enerjisinin büyük bir kısmını kaybedip kinetik enerjisi 100eV civarına düşerse artık valans kabuğundaki elektronlar haricindeki elektronlarla etkileşmeye giremez. 15,8eV'den düşük enerjilerde ise tamamen elastik olmayan etkileşmelere girmez hale gelir.

Hesaplama, E_0 başlangıç enerjisinden E_{kes} kesilim enerjisine kadar yapılır ki kesilim enerjisi gelen pozitronun yok olması anlamını taşır.

4. SONUÇLAR ve TARTIŞMA

Yukarıda verilen benzetişim programı ile Alüminyum, Berilyum, Silikon, Bakır atomlarıyla, Su ve Adenin, Guanin, Timin, Sitozin gibi DNA içinde yer alan bileşikler için ortalama serbest yol ile durdurma gücü hesaplamaları yapılmış olup ilgili Tablolar ve Grafikler aşağıda verilmiştir.

İki tip tabloya yer verilmiştir (a ve b). Birinci (a) tip tablolar benzetişim sonucu elde edilen rezonans benzeri ve serbest etkileşme sonuçlarının ayrıntılı olarak verildiği tablolardır. Birinci (a) tip tablolarda yer alan sütunlar üç grup halinde olup birinci grupta pozitronun geliş enerjisi (eV) olarak verilmiştir, maddenin kabuk yapısı 1s, 2s, 2p vb. yerine 1, 2, 3 vb. şeklinde numaralanmıştır. İkinci ve üçüncü grup sütunlar Rezonans ve Serbest Tip etkileşme için elde edilen ortalama serbest yol (OSY (cm)), ortalama enerji kaybı (W (eV)) ve bu sonuçlardan hesaplanan hedef maddenin yoğunluk başına durdurma gücü (Durdurma Gücü/ ρ (eVcm²/g)) değerlerini vermektedir. Bazı makalelerde ortalama serbest yolun tersi (1/OSY) de kullanıldığından bu değerlerde hesaplanarak tablolarda yer almıştır.

Ayrıca OSY (kuramsal) olarak verilen sütun, ilgili hedef madde için tesir kesiti formülünden hesaplanan değer olup benzetişim sonucu elde edilen ortalama serbest yol değerleri ile karşılaştırma yapılabilmesi için konulmuştur.

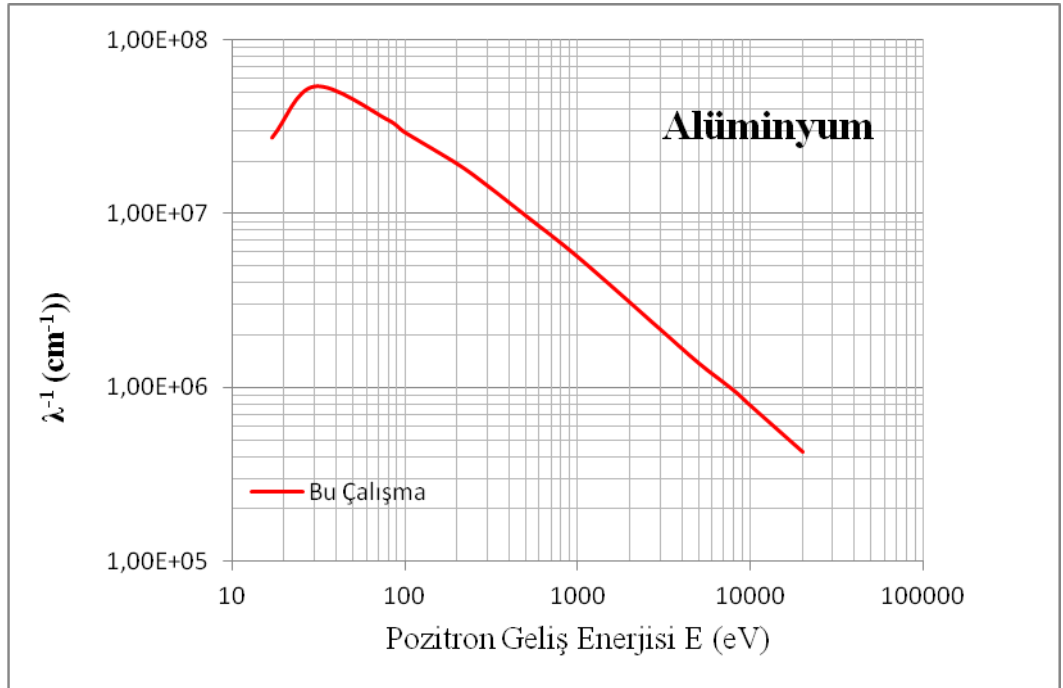
Ortalama olarak hesaplanan değerlerin (OSY, W) her biri en az 15000 sonucun ortalaması alınarak elde edilmiştir. Yüksek enerjili pozitronların tüm seviyeler ile yeterli sayıda etkileşiminin izlenebilmesi için bu değer 30000 – 40000 'e kadar da çıkarılmıştır.

İkinci (b) tip tablolar ise hedef madde için (2.33) ve (2.34) eşitlikleri ile hesaplanan sonuçların yer aldığı tablolar olup grafikler bu tablolardaki değerler ile çizilmiştir.

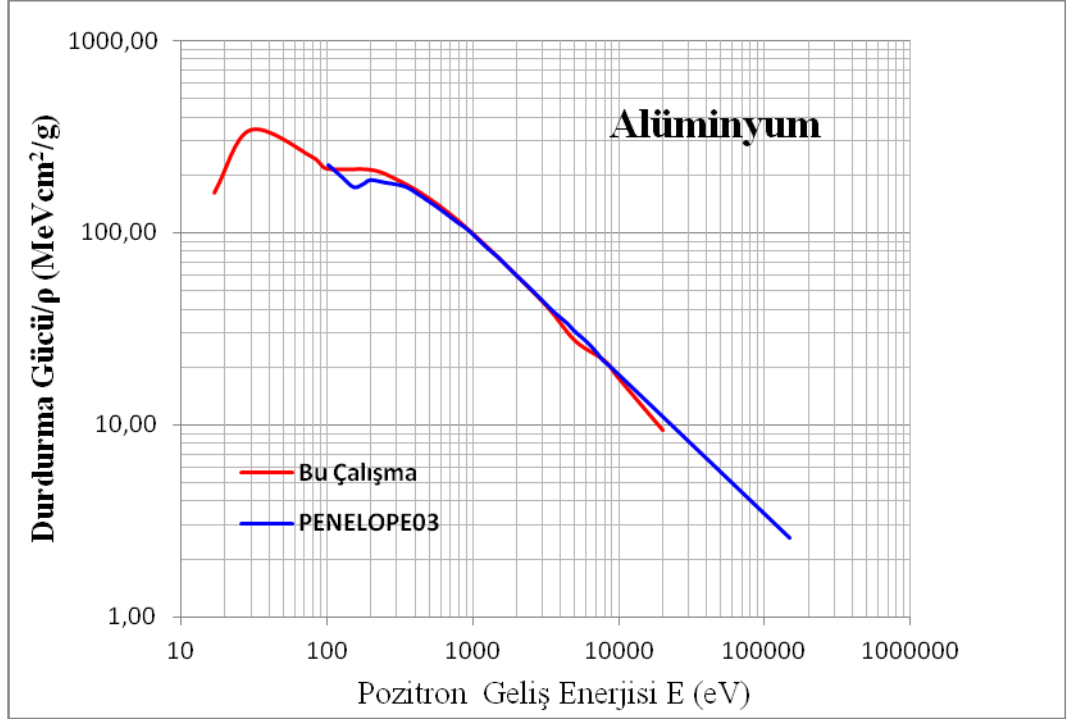
Alüminyum, silikon, bakır ve su hedefleri için benzetişim sonuçlarının karşılaştırılması amacıyla (Gümüş, vd., 2006) makalesinde yer alan ilgili grafiklere yer verilmiş olup sonuçların benzetişim programı PENELOPE sonuçları ile uyduğu görülmüştür. PENELOPE sonuçları 100eV pozitron geliş enerjisine kadar verilmiş olması nedeni ile daha küçük sonuçların karşılaştırılması yapılamamıştır.

Tablo 4.1b Alüminyum için Ortalama Serbest Yolun Tersine ve Kütle Durdurma Gücü

E (eV)	λ^{-1} (cm ⁻¹)	DG (eV/cm)	DG/ ρ (MeVcm ² /g)
20000	4,23E+05	2,53E+07	9,37
10000	7,81E+05	4,71E+07	17,45
8000	9,56E+05	5,83E+07	21,59
5000	1,38E+06	7,42E+07	27,49
3000	2,15E+06	1,18E+08	43,81
1000	5,63E+06	2,68E+08	99,22
500	9,73E+06	4,09E+08	151,45
300	1,45E+07	5,13E+08	189,84
200	1,94E+07	5,75E+08	213,00
100	2,94E+07	5,83E+08	215,78
80	3,47E+07	6,69E+08	247,81
30	5,43E+07	9,27E+08	343,17
17	2,75E+07	4,36E+08	161,57



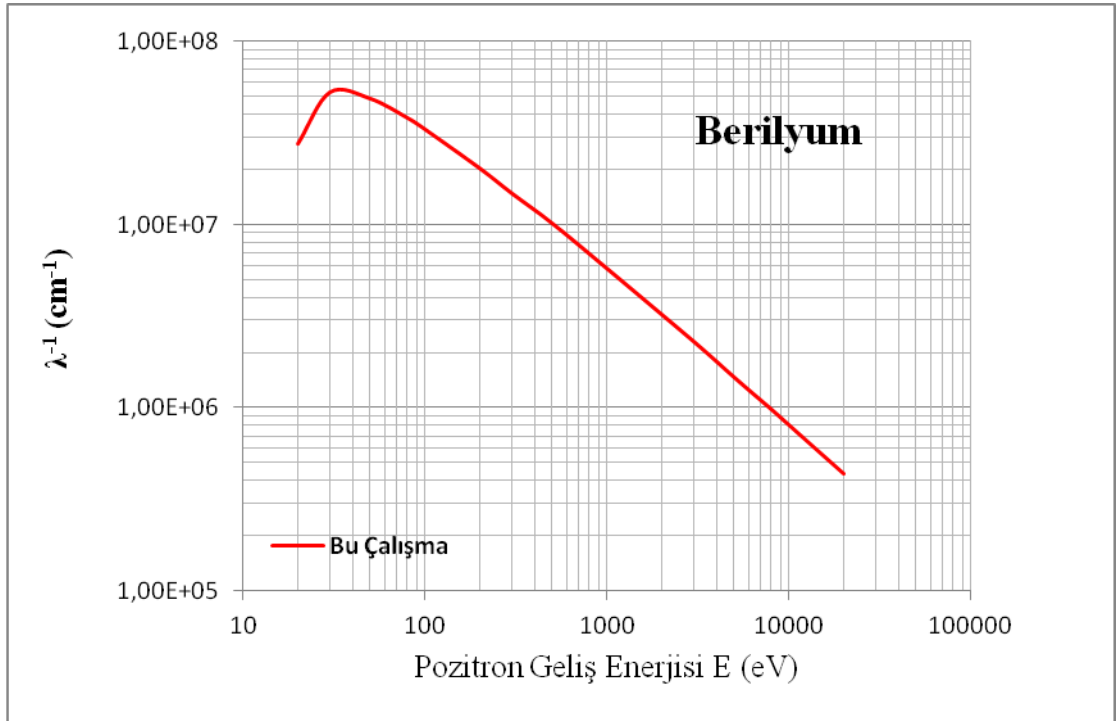
Şekil 4.1 Alüminyum için Ortalama Serbest Yolun Tersine



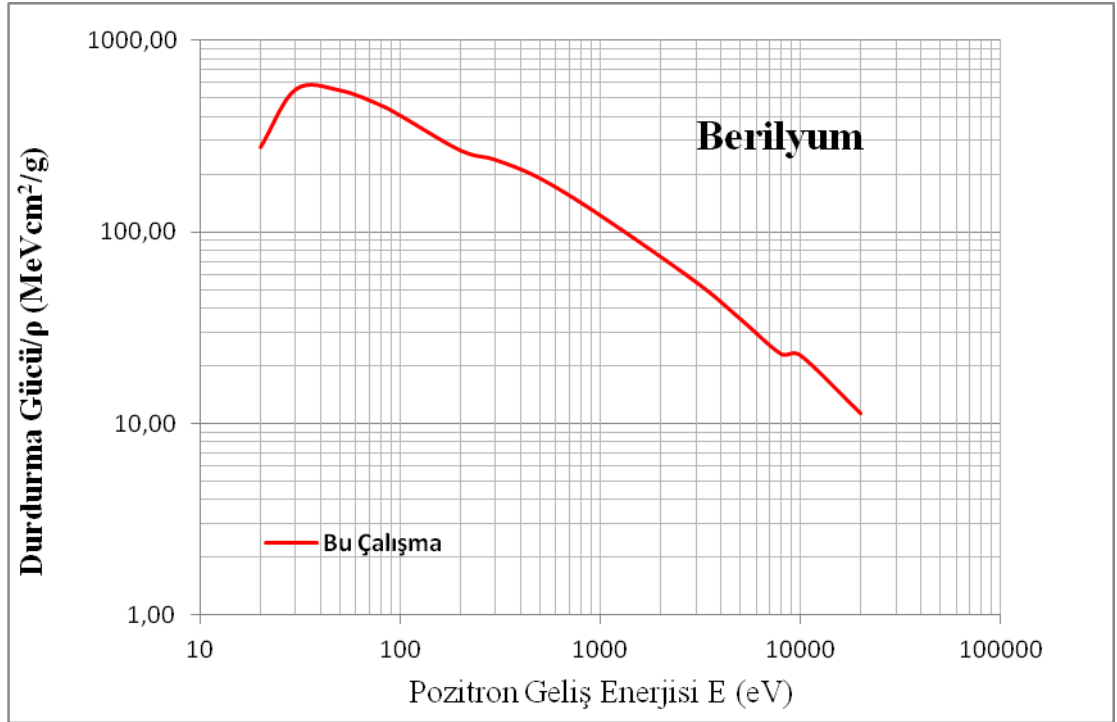
Şekil 4.2 Alüminyum için Kütle Durdurma Gücü (PENELOPE03 sonuçları (Gümüş vd., 2006) makalesinden alınmıştır.)

Tablo 4.2b Berilyum için Ortalama Serbest Yolun Tersisi ve Kütle Durdurma Gücü

E (eV)	λ^{-1} (cm^{-1})	DG (eV/cm)	DG/ ρ (MeVcm^2/g)
20000	4,37E+05	2,10E+07	11,33
10000	8,06E+05	4,21E+07	22,76
8000	9,83E+05	4,28E+07	23,12
5000	1,47E+06	6,52E+07	35,27
3000	2,30E+06	1,02E+08	54,98
1000	5,75E+06	2,26E+08	122,30
500	1,02E+07	3,53E+08	190,77
300	1,48E+07	4,41E+08	238,30
200	2,03E+07	4,94E+08	267,27
100	3,31E+07	7,51E+08	405,83
80	3,83E+07	8,50E+08	459,54
50	4,87E+07	1,02E+09	549,88
30	5,28E+07	1,03E+09	557,76
20	2,76E+07	5,14E+08	277,62



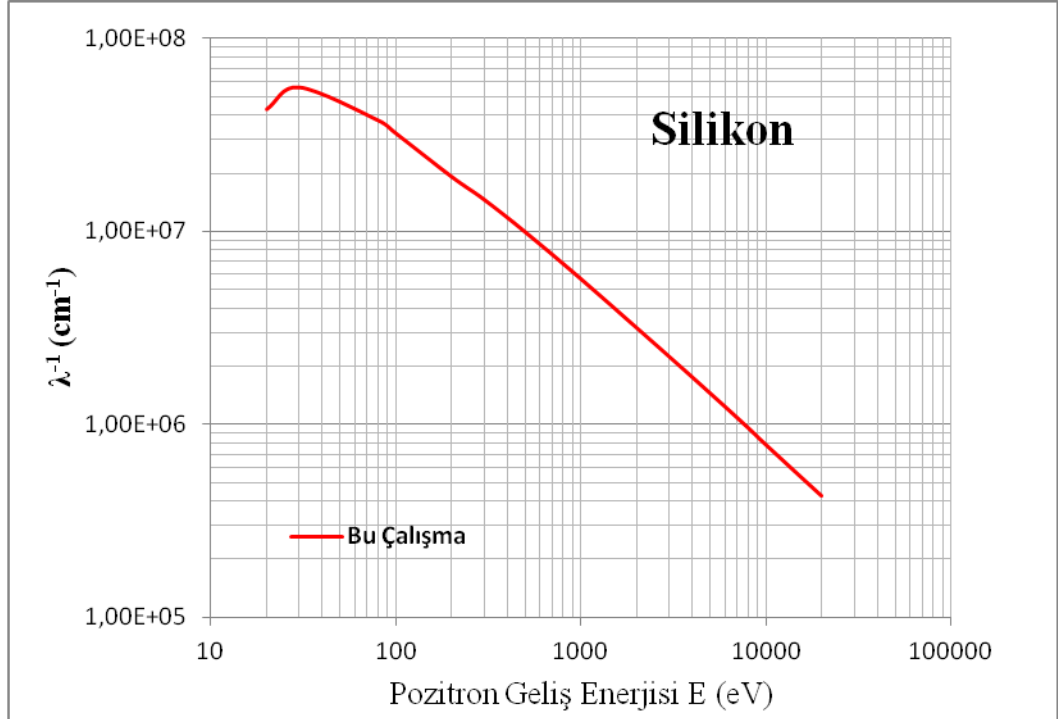
Şekil 4.3 Berilyum için Ortalama Serbest Yolun Tersisi



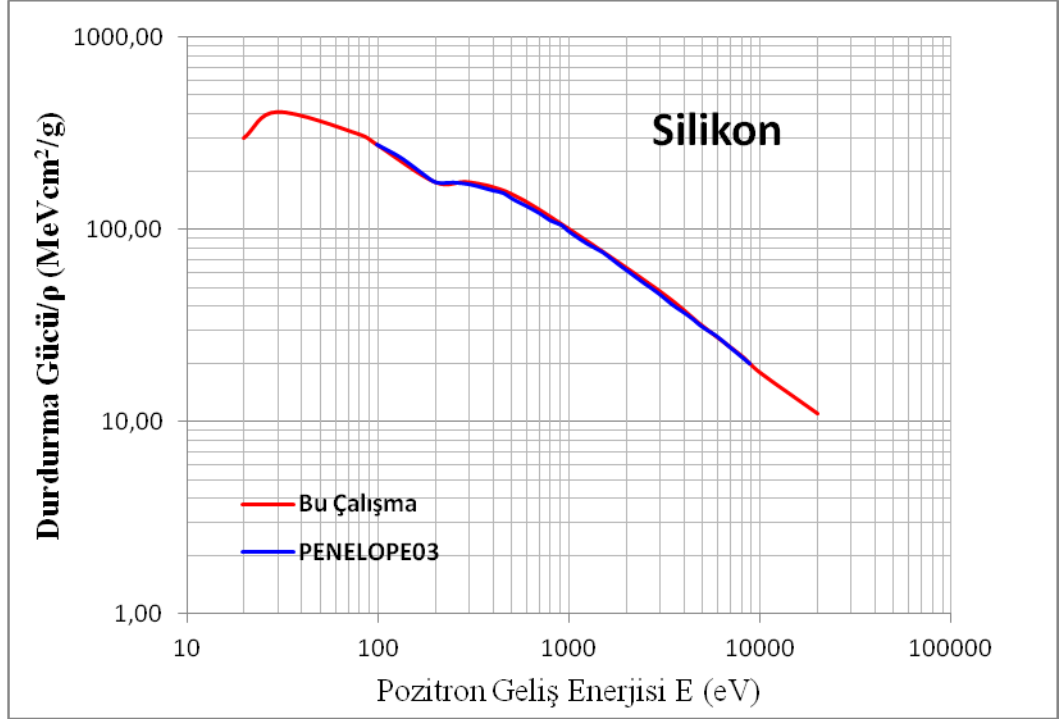
Şekil 4.4 Berilyum için Kütle Durdurma Gücü

Tablo 4.3b Silikon için Ortalama Serbest Yolun Tersine ve Kütle Durdurma Gücü

E (eV)	λ^{-1} (cm^{-1})	DG (eV/cm)	DG/ ρ (MeVcm^2/g)
20000	4,28E+05	2,68E+07	11,09
10000	7,88E+05	4,39E+07	18,13
8000	9,67E+05	5,36E+07	22,16
5000	1,45E+06	7,67E+07	31,68
3000	2,25E+06	1,16E+08	47,87
1000	5,69E+06	2,45E+08	101,20
500	9,95E+06	3,73E+08	154,01
300	1,47E+07	4,29E+08	177,17
200	1,92E+07	4,28E+08	176,96
100	3,23E+07	6,67E+08	275,77
80	3,77E+07	7,60E+08	314,24
30	5,60E+07	9,93E+08	410,26
20	4,31E+07	7,26E+08	300,10



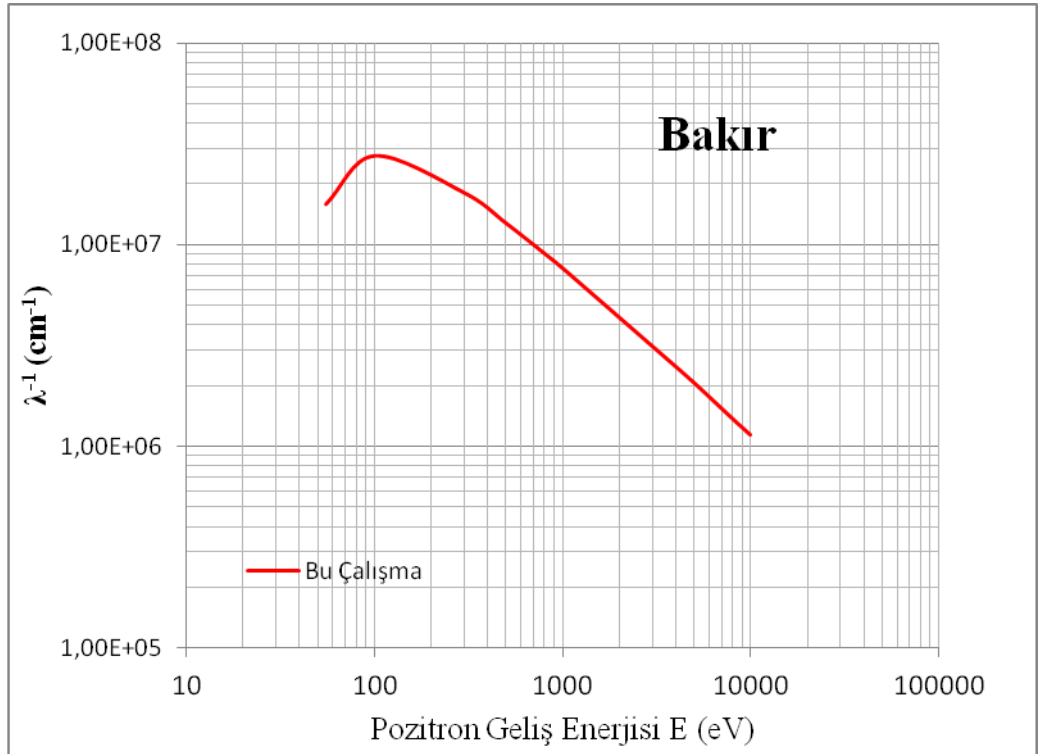
Şekil 4.5 Silikon için Ortalama Serbest Yolun Tersine



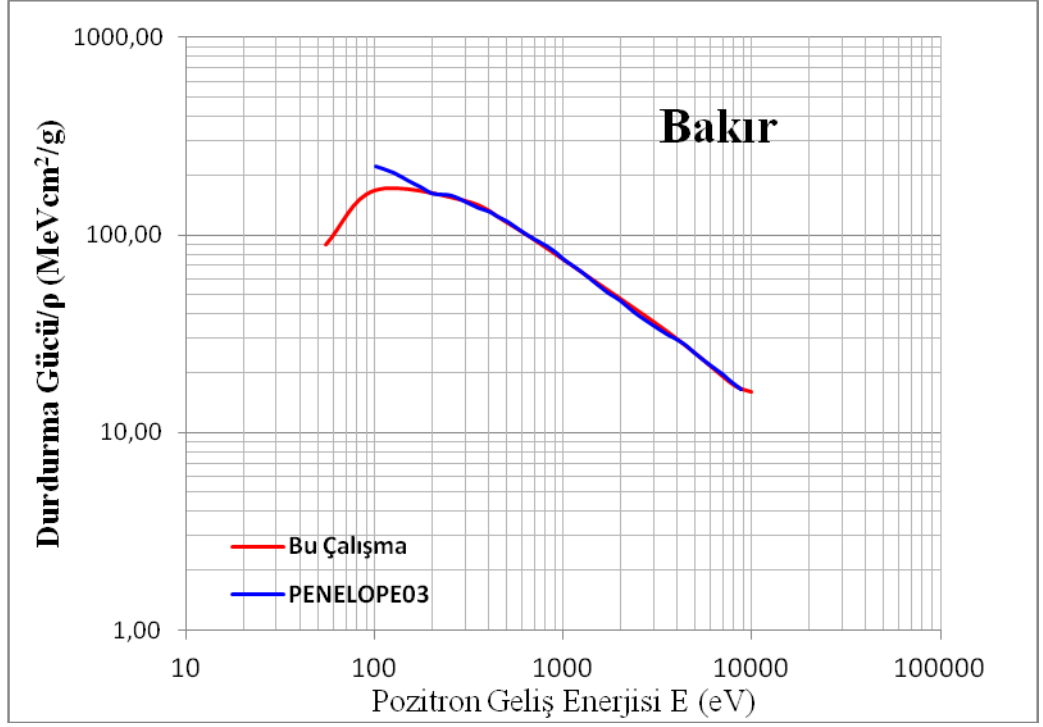
Şekil 4.6 Silikon için Kütle Durdurma Gücü (PENELOPE03 sonuçları (Gümüş vd., 2006) makalesinden alınmıştır.)

Tablo 4.4b Bakır için Ortalama Serbest Yolun Tersine ve Kütle Durdurma Gücü

E (eV)	λ^{-1} (cm^{-1})	DG (eV/cm)	DG/ ρ (MeVcm^2/g)
10000	1,13E+06	16,12	16,12
8000	1,37E+06	17,55	17,55
5000	2,06E+06	25,39	25,39
3000	3,13E+06	36,71	36,71
1000	7,65E+06	75,41	75,41
800	9,06E+06	87,20	87,20
500	1,28E+07	116,38	116,38
300	1,81E+07	149,46	149,46
100	2,77E+07	168,47	168,47
55	1,59E+07	89,61	89,61



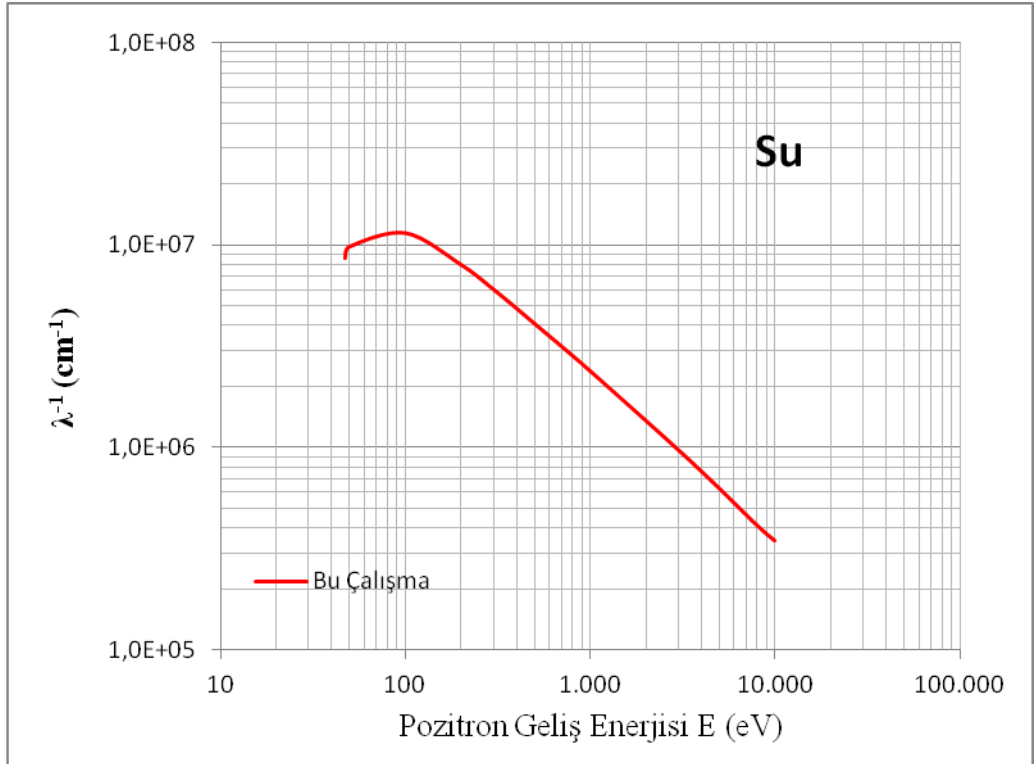
Şekil 4.7 Bakır için Ortalama Serbest Yolun Tersine



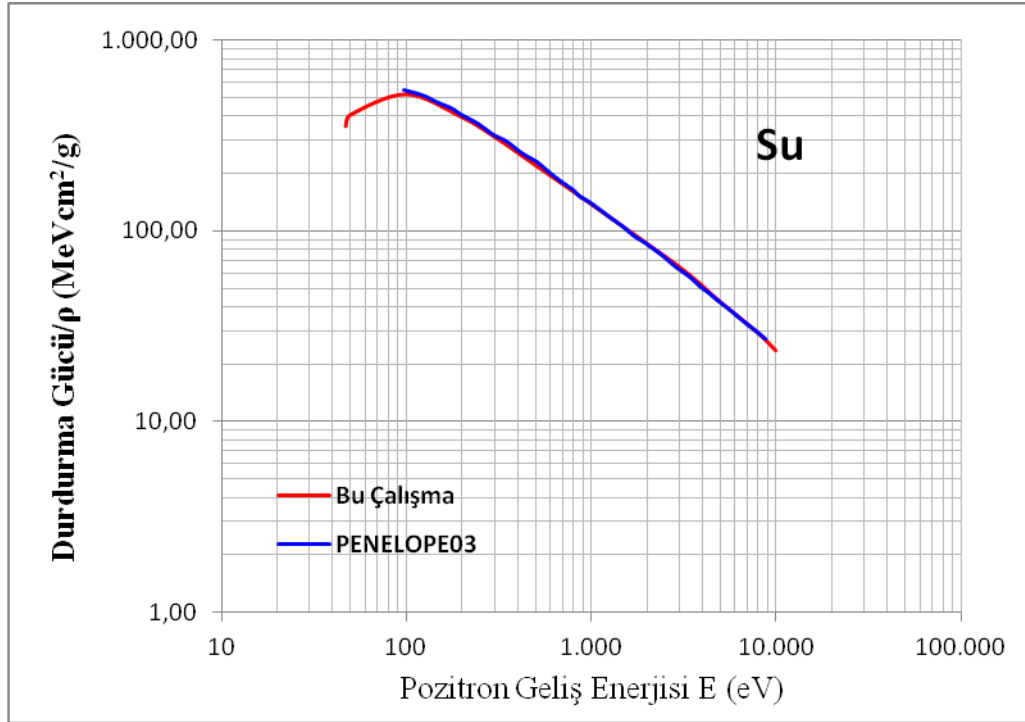
Şekil 4.8 Bakır için Kütle Durdurma Gücü (PENELOPE03 sonuçları (Gümüş vd., 2006) makalesinden alınmıştır.)

Tablo 4.5b Su için Ortalama Serbest Yolun Tersine ve Kütle Durdurma Gücü

E (eV)	çarpan	λ^{-1} (cm^{-1})	DG/ ρ (MeVcm^2/g)
10000	3	3,45E+05	23,50
8000	3	4,13E+05	29,15
5000	3	6,28E+05	42,37
3000	3	9,74E+05	64,56
1000	3	2,39E+06	137,89
500	3	4,10E+06	220,48
300	3	6,05E+06	310,69
200	3	8,03E+06	393,56
100	3	1,15E+07	518,72
50	3	9,87E+06	405,20
47	3	8,64E+06	352,48



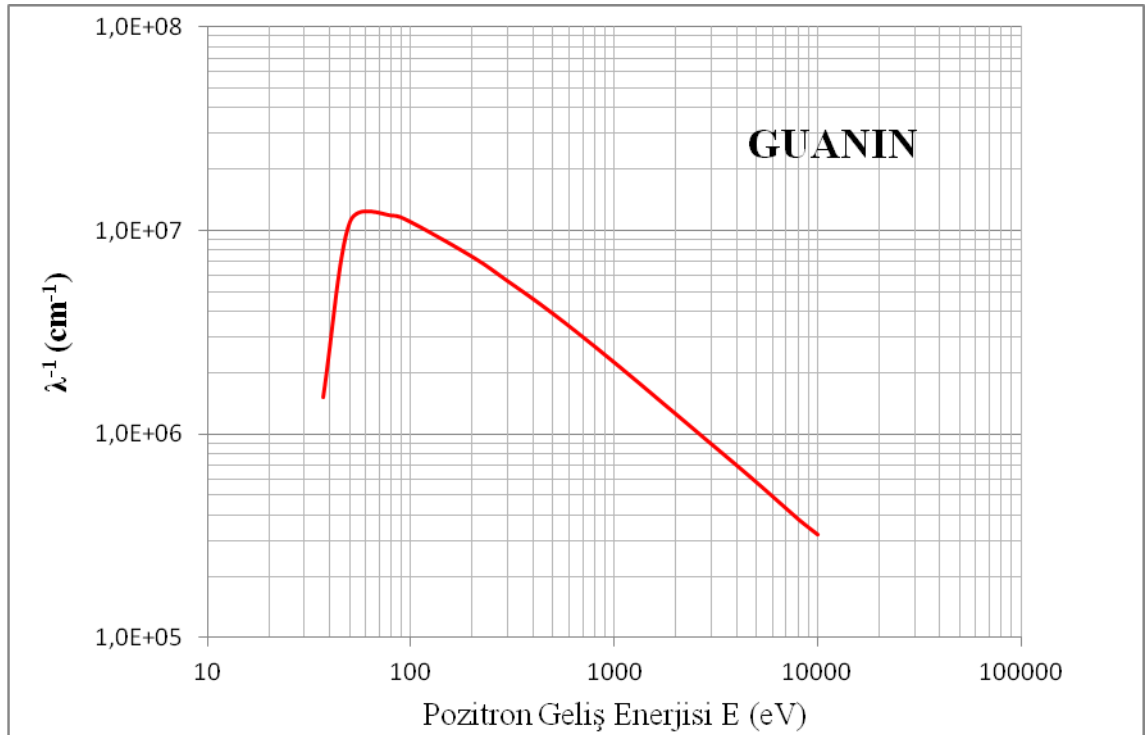
Şekil 4.9 Bakır için Ortalama Serbest Yolun Tersine



Şekil 4.10 Su için Kütle Durdurma Gücü (PENELOPE03 sonuçları (Gümüş vd., 2006) makalesinden alınmıştır.)

Tablo 4.6b Guanin için Ortalama Serbest Yolun Tersisi ve Kütle Durdurma Gücü

E (eV)	çarpan	λ^{-1} (cm ⁻¹)	DG/ ρ (MeVcm ² /g)
10000	16	3,23E+05	21,07
8000	16	3,85E+05	25,52
5000	16	5,82E+05	40,51
3000	16	8,97E+05	55,09
1000	16	2,25E+06	122,71
500	16	3,90E+06	193,66
300	16	5,63E+06	266,51
200	16	7,43E+06	337,20
100	16	1,10E+07	456,70
80	16	1,18E+07	477,68
50	16	1,10E+07	416,90
37	16	1,52E+06	56,01



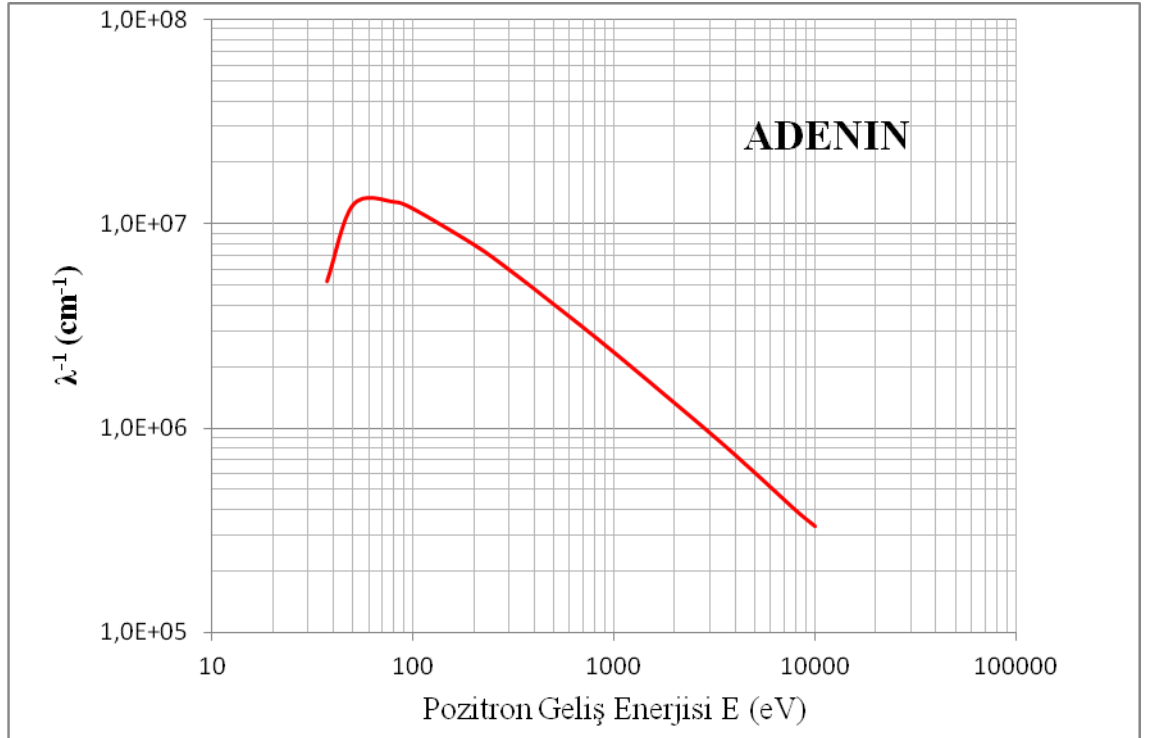
Şekil 4.11 Guanin için Ortalama Serbest Yolun Tersisi



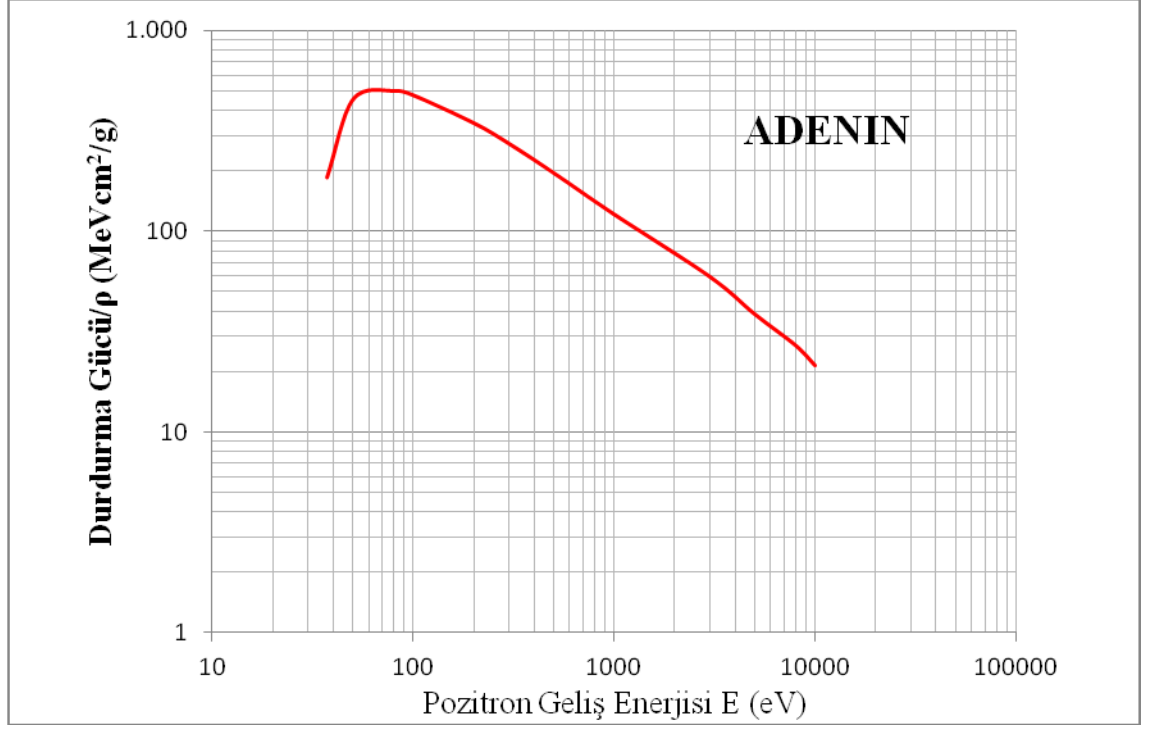
Şekil 4.12 Guanin için Kütle Durdurma Gücü

Tablo 4.7b Adenin için Ortalama Serbest Yolun Tersisi ve Kütle Durdurma Gücü

E (eV)	çarpan	λ^{-1} (cm^{-1})	DG/ ρ (MeVcm^2/g)
10000	15	3,30E+05	2,15E+01
8000	15	3,96E+05	2,70E+01
5000	15	6,04E+05	3,87E+01
3000	15	9,43E+05	5,92E+01
1000	15	2,33E+06	1,21E+02
500	15	4,02E+06	1,94E+02
300	15	5,93E+06	2,71E+02
200	15	7,86E+06	3,44E+02
100	15	1,18E+07	4,73E+02
80	15	1,27E+07	4,98E+02
50	15	1,24E+07	4,53E+02
37	15	5,21E+06	1,85E+02



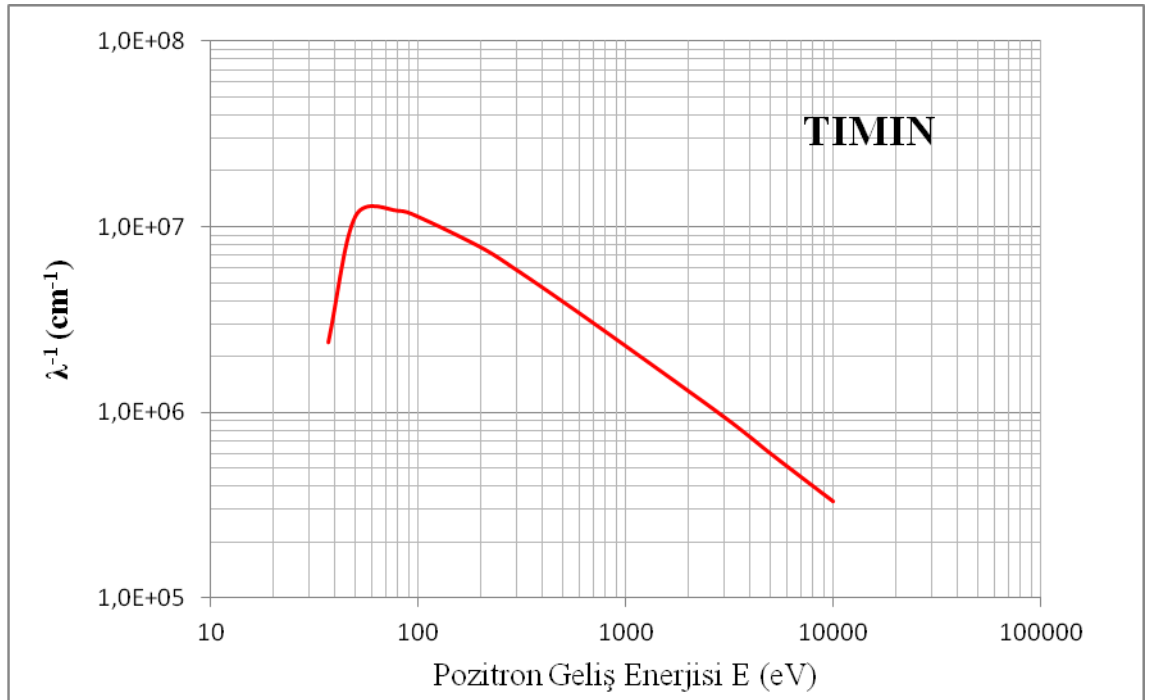
Şekil 4.13 Adenin için Ortalama Serbest Yolun Tersisi



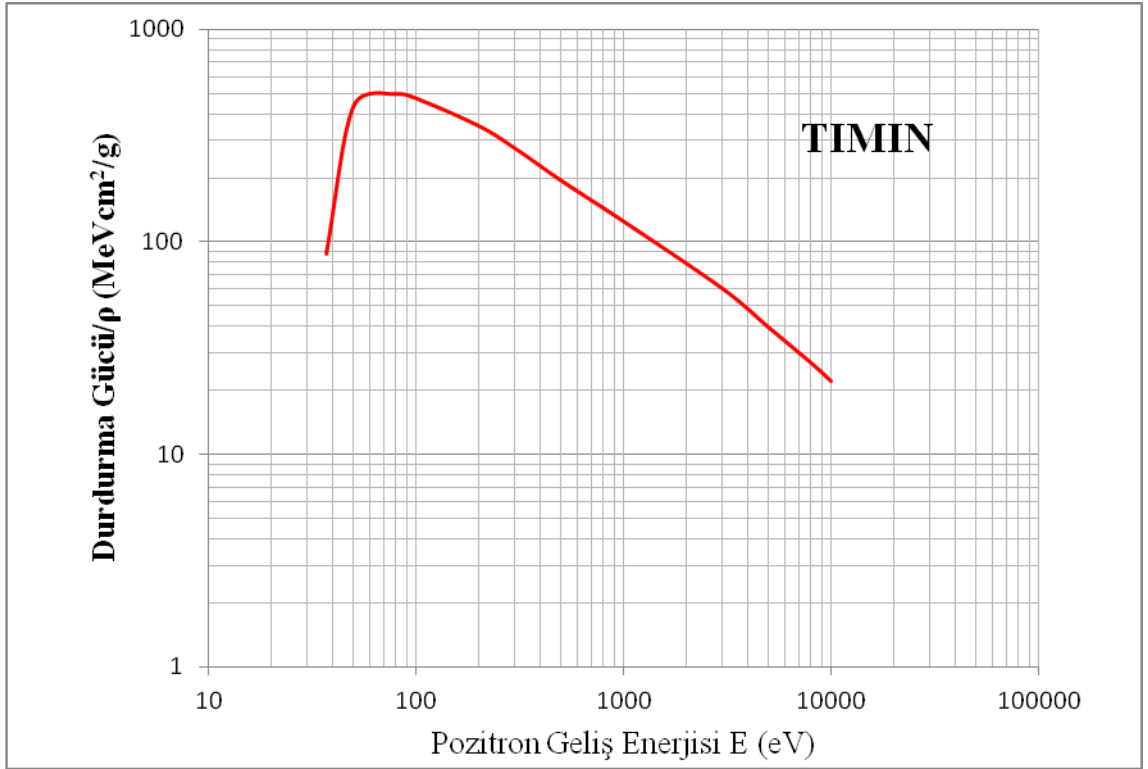
Şekil 4.14 Adenin için Kütle Durdurma Gücü

Tablo 4.8b Timin için Ortalama Serbest Yolun Tersine ve Kütleye Durdurma Gücü

E (eV)	çarpan	λ^{-1} (cm^{-1})	DG/ ρ (MeVcm^2/g)
10000	15	3,31E+05	22,01
8000	15	4,00E+05	26,86
5000	15	5,99E+05	39,42
3000	15	9,41E+05	60,04
1000	15	2,29E+06	124,57
500	15	3,96E+06	194,16
300	15	5,86E+06	275,24
200	15	7,82E+06	351,57
100	15	1,14E+07	473,55
80	15	1,23E+07	495,24
50	15	1,15E+07	433,70
37	15	2,39E+06	87,55



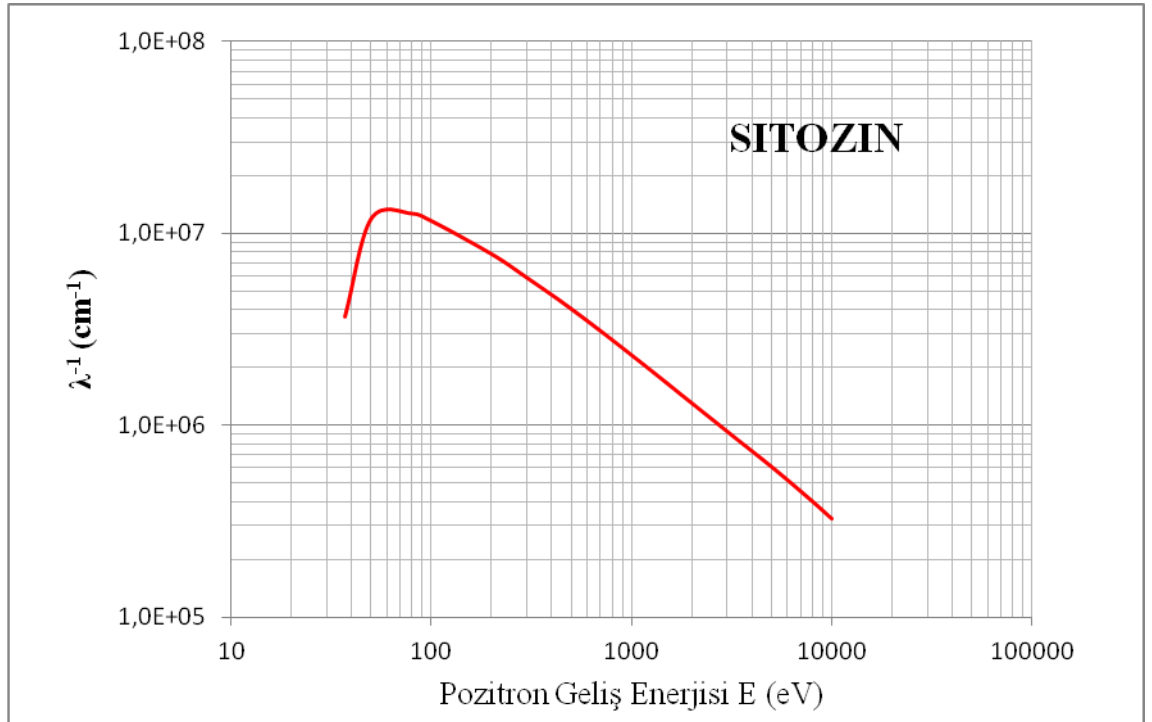
Şekil 4.15 Timin için Ortalama Serbest Yolun Tersine



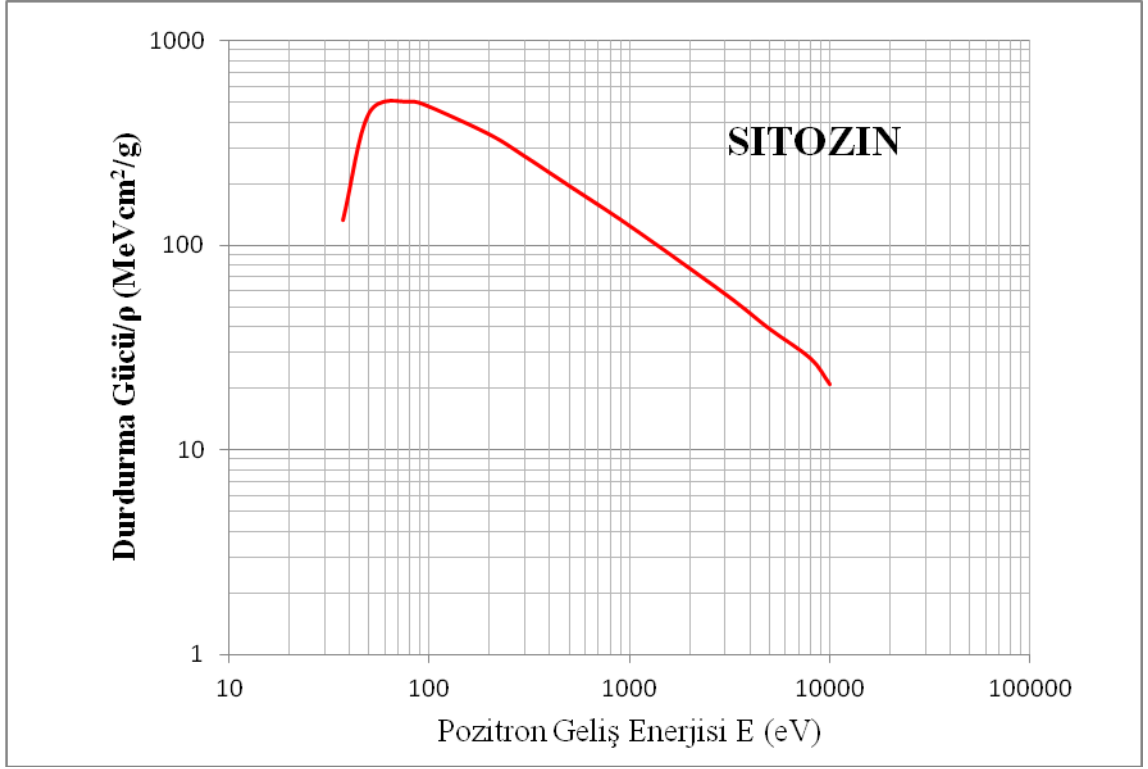
Şekil 4.16 Timin için Kütle Durdurma Gücü

Tablo 4.9b Sitozin için Ortalama Serbest Yolun Tersine ve Kütle Durdurma Gücü

E (eV)	çarpan	λ^{-1} (cm^{-1})	DG/ ρ (MeVcm^2/g)
10000	13	3,27E+05	21,03
8000	13	4,03E+05	28,15
5000	13	6,10E+05	39,22
3000	13	9,32E+05	58,05
1000	13	2,33E+06	124,91
500	13	4,04E+06	195,69
300	13	5,88E+06	272,63
200	13	7,80E+06	348,58
100	13	1,16E+07	476,66
80	13	1,27E+07	504,27
50	13	1,19E+07	444,88
37	13	3,68E+06	133,15



Şekil 4.17 Sitozin için Ortalama Serbest Yolun Tersine



Şekil 4.18 Sitozin için Kütle Durdurma Gücü

KAYNAKLAR

- Akar A.**, 2005, “Bazı Biyolojik Materyallerde Enerji Transferi ve Durdurma Gücü”, Doktora Tezi.
- Bayın Ö.**, 1974, “Modern Kavramlar Yaklaşımıyla Kimya”, Öğretmen Matbaası, Ankara
- Berger M.J. and S.M. Seltzer**, 1983, “Stopping powers and ranges of electrons and positrons”, National Bureau of Standards Report (now **NIST**), NBSIR 82-2550 A, (also Web site www.physics.nist.gov).
- Bethe H.A.**, 1930, Ann. Physik 5, 325.
- Bloch F.**, 1933, Ann. Physik 16, 285.
- Bohr N.**, 1948, “The Penetration of Atomic Particles Through Matter”, Kgl. Danske Vidensk. Selsk., Mat.-Fys. Medd. 18 no 8.
- Bransden B.H., C.J.Joachain**, 1989, “Atom ve Molekül Fiziği”, (Çev.Fevzi Köksal, Hasan Gümüş) Ondokuz Mayıs Üniversitesi Yayınları, yayın No:43, Samsun, 1989
- Fernandez-Vera J.M., D.Liljequist, S.Csillag, R.Raty, F.Salvat**, 1995, “Monte Carlo Simulation of 0.1-100keV electron and positron transport in solids using optical data and partial wave methods”, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 108 (1996) 35-50
- Gryzinski M.**, 1965, “Two-Particle Collision. I. General Relations for Collisions. In the Laboratory, Physical Review”, Vol.138, Number 2A, A305-A321.
- Gryzinski M.**, 1965, “Two-Particle Collision. II. Coulomb Collisions in the Laboratory System of Coordinates”, Physical Review, Vol.138, Number 2A, A322-A335.
- Gryzinski M.**, 1965, “Classical Theory of Atomic Collisions. I. Theory of Inelastic Collisions”, Physical Review, Vol.138, Number 2A, A336-A358.

Gümüő, H., Ö.Kabaday, M.Ç.Tufan, 2006, “Calculation of the Stopping Power for Intermediate Energy Positrons”, Chinese Journal of Physics, Vol.44, No.4, 290

Hirayama H., Y.Namito, 2001, “Lectures Notes of Radiation Transport Calculation by Monte Carlo Method”, (English Version), Revised 10.11.2001, High Energy Accelerator Reserach Organization 1-1 Oho, Tsukuba-shi, Ibaraki, 305-0801 Japan

ICRU Report 37, “International Commission on Radiation Units and Measurements”, Bethesda, MD, USA, 1984.

İlgım B., 1976, “Modern Fizikten Örnek Problemler”, Matbaa Teknisyenleri Basımevi, 1976. (Birimler, Atomlara Ait Bazı Deđerler vs.)

Inokuti M., 1971, “Inelastic Collision of Fast Charged Particles with Atoms and Molecules”, Rev.Mod.Phys. 43, 297-394

Krane K.S., 2006, “Nükleer Fizik Cilt I-II”, (Çev.Ed. Başar Şarer) Palme Yayıncılık, II.Baskı 2006

Lee K., Guang-Sup Cho, Duk-In Choi, 1990, “Monte Carlo Simulation of Energy Dissipation in Electron Beam Lithography Including Secondary Electron Generation”, J. Appl. Phys. 67 (12), 7560 - 7567

Liljequist D., 1983, “A Simple Calculation of Inelastic Mean Free Path and Stopping Power for 50eV – 50keV Electrons in Solids”, J.Phys. D: Appl. Phys., 16(1983), 1567-1582.

Liljequist D., 1984, “Simple generalized Oscillator Strength Density Model Applied to The Simulation of keV Electron_Energy_Loss Distributions”, J. Appl. Phys. 57 (3), 657- 665

Martinez J.D., R.Mayol, F.Salvat, 1989, “Monte Carlo Simulation of Kilovolt Electron Transport in Solids”, J. Appl. Phys. 67 (6),2955- 2964

Negreanu C., X.Llovet, R.Chawla, F.Salvat, 2005, "Calculation of multiple-scattering angular distributions of electrons and positrons", *Radiation Physics and Chemistry*, 74 (2005) 264-281

Salvat F., 2003, "Optical Model Potential for Electron and Positron Elastic Scattering by Atoms", *Physical Review A* 68, (012708) 1-17

Taxiarchis S.V., 2008, "Development of a Monte Carlo Simulation Model of The Signal Formation Processes Inside Photoconducting Materials For Active Matrix Flat Panel Direct Detectors in Digital Mammography", Doctorate Thesis, University of Patras, Patras

Tökesi K., T.Mukoyama; 1994, "Monte Carlo for the Study of Electron-Solid Interactions", *Bull.Inst.Chem.Res., Kyoto Univ.*, Vol.72, No.3-4 (1994) 352-360

Wentzel G., *Z. Physik*, 40, 590, (1927)

ÖZGEÇMİŞ

1958 yılında Edirne’de doğdum. İlk ve orta dereceli okulları Edirne’de bitirdikten sonra yüksek öğrenimimi Ankara Üniversitesi Fen Fakültesi Fizik Bölümünde yaptım. Lisans öğrenimim sırasında ilgilenmeye başladığım bilgisayar işletmenliği ve programcılığını 1979-1981 yıllarında stajyer olarak çalıştığım SSK Genel Müdürlüğünde geliştirdim. Uzun bir süre ticari alanda çalıştıktan sonra 1992 yılında Trakya Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümünde Bilgisayar Uzmanı olarak işe başladım. Yine 1992 yılında Trakya Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalında başladığım Yüksek Lisans öğrenimimi 1994 yılında bitirdim. Bir müddet öğrenime ara verdikten sonra 2002’de doktora öğrenimime başladım. Halen Trakya Üniversitesi Fen Fakültesi Dekanlığında Bilgisayar Uzmanı olarak çalışmaktayım.